



TITLE:

# スピンモデルによる適応的進化の 統計力学的研究(修士論文(2007年度 ))

AUTHOR(S):

坂田, 綾香

---

CITATION:

坂田, 綾香. スピンモデルによる適応的進化の統計力学的研究(修士論文(2007年度)). 物性研究 2008, 90(6): 825-859

ISSUE DATE:

2008-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/142661>

RIGHT:

**修士論文** (2007年度)

## スピンモデルによる適応的進化の統計力学的研究

東京大学大学院 総合文化研究科

坂田綾香<sup>†</sup>

## 目 次

<b>1 Introduction</b>	825
<b>2 Model</b>	827
<b>3 数値計算の結果と考察</b>	829
3.1 適応度とエネルギーの振る舞い	829
3.2 $J$ の構造	831
3.3 緩和ダイナミクスの温度依存性	835
3.4 変異に対するロバストネス	836
<b>4 解析計算による説明 —適応度地形の構造—</b>	838
4.1 強磁性体の適応度	838
4.1.1 強磁性 $J$ の分配関数	838
4.1.2 強磁性体の適応度	839
4.2 ゲージ変換と Mattis state $J$ の適応度	839
4.2.1 ゲージ変換	840
4.2.2 ゲージ変換による Mattis state の導出	842
4.3 ターゲットのゲージ変換に対する $J$ の適応度変化	843
4.4 local Mattis state の適応度	846
4.5 ターゲットに反強磁性相互作用が入った $J$ の適応度	848
4.6 結果	848
4.7 sub neutral space をつなぐ $J$ の適応度	849
4.8 適応度地形の温度依存性と変異に対するロバストネス	852
<b>5 Conclusion</b>	853
<b>A <math>N \rightarrow \infty</math> での local Mattis state の分配関数と適応度の近似形</b>	855

**1 Introduction**

これまで分子生物学の発展により、遺伝子やアミノ酸などの、生命の機能を担うパーツの性質が明らかにされてきた。しかしパーツ一つだけでは、生命が見せる豊かな機能は発揮されず、複数集まることによって初めて機能する。実際にこれらのパーツを組み合わせる場合、その方法は膨大な数に及ぶ。その中で機能を持つ組み合わせは、ほんの一部である。

例えばタンパク質について考えてみる。タンパク質の一次元鎖は 20 種類のアミノ酸から構成される。アミノ酸の一次元鎖は、分子内、分子間の相互作用に従って三次構造に折り畳まれる。その一次元鎖が、ある唯一の三次構造 (native structure) に折り畳まれることで、タンパク質は

<sup>†</sup>E-mail: ayaka@huku.c.u-tokyo.ac.jp

正しく機能する。この性質はタンパク質に特異的なものであり、タンパク質と同程度の分子量をもつ一般的な高分子鎖においては、唯一の状態に折り畳まれることはほとんどない。このタンパク質の折り畳みの過程は古くから研究されており、相互作用同士が互いに consistent であること (consistency principle, [1]), またそのポテンシャル地形は、あらゆる初期条件から唯一の解 (native structure) をもたらすものであることなどが知られている。この特徴的ポテンシャル地形は、ファンネルと呼ばれる [2],[3]。

タンパク質同様に、RNA においても一次元鎖から二次構造への折り畳みが正確であることが知られている。このように、実際のタンパク質や RNA の配列には、ランダムにアミノ酸や塩基を組み合わせで作った配列にはない特徴がある。これらの配列は、進化を通して、膨大な組み合わせ方の中から選ばれたものであると考えられている。

ここで、一般化された「遺伝子型」と「表現型」「適応度」という単語を用いて、このような進化の過程を考えてみる。以下、情報をコードする配列を「遺伝子型」と呼び、遺伝子型の持つ情報に基づいて実際に発現した性質を「表現型」と呼ぶ。また表現型から決まる、その配列の生存の有利さを「適応度」と呼ぶ。進化とは、遺伝子型に変異が起こり、その影響が表現型に現れ、適応度が変化し、適応度の高い個体が生き残り、結果として、環境に適応した表現型を発現する遺伝子型が得られる、という仕組みで進む。例えばタンパク質であれば「遺伝子型」はアミノ酸配列に対応する。「遺伝子型」から折り畳みのダイナミクスを通して三次構造が得られる。この三次構造が「表現型」であり、表現型から「適応度」であるタンパク質の機能が決まる。また細胞であれば、「遺伝子型」はそのまま遺伝情報であり、そこから遺伝子発現のダイナミクスを経て遺伝子が発現する。発現した遺伝子パターンが「表現型」であり、表現型から適応度が決まる。また多細胞生物の発生であれば、「遺伝子型」は遺伝情報であり、発生過程のダイナミクスを経て多細胞の状態に至る。この多細胞の状態が「表現型」であり、表現型から適応度が決まる。

表現型は遺伝子型が与えるルールに基づいて時間発展した結果として表れるものである。集団遺伝学においては、遺伝子型は表現型から決定論的に決まると考え、遺伝子型を引数とする関数により適応度を決め、集団内の遺伝子頻度の変化を調べる方法が主流であった。実際の表現型発現ダイナミクスは、環境からの揺らぎを受けるため決定論的ではなく、同じ遺伝子を持つ個体間でも表現型は揺らいでいる [4]。近年、これらの揺らぎを定量的に測ることが可能になり、表現型揺らぎと遺伝子型進化の関係について活発に議論されるようになった [5],[6]。理論の面からも、遺伝子型と表現型の双方の揺らぎを取り入れたモデルを用いて、表現型の揺らぎが進化にもたらす影響について議論する必要がある。

本研究では、遺伝子型から表現型の発現に確率的な表現型発現ダイナミクスを挟み、その過程にかかる揺らぎが進化に与える影響を検証する。同様な目的の研究として、RNA のモデル [7] や遺伝子ネットでのモデル [8],[9],[11],[12],[13] があるが、遺伝子型と表現型という二自由度のダイナミクスを、スピンモデル上で表現する。抽象的であるが実体があり、また解析的に扱えるスピンモデル上でモデル化することにより、統計物理の観点からこのような問題を考える。

ここで、議論を進める基盤となる概念についていくつか説明する。まず、遺伝子型の状態空間は遺伝子型空間と呼ばれる。 $N$  個の遺伝子座を持つ半数体を考え、各遺伝子は二つの対立遺伝子 A, B を持つとする。仮にタンパク質の状態空間を議論するのであれば、各「遺伝子」(アミノ酸) は 20 種類の状態をとり得る。例として、簡単に対立遺伝子が二つの場合を考える。 $i$  番目の遺伝子座に遺伝子 A がある場合は 1 を、B がある場合は 0 で示す。 $N$  遺伝子座の配位は 1 と 0 からなる  $N$  次元ベクトルで表される。このベクトルを遺伝子型とする。各遺伝子型は超立方格子上の格子点に置き、その最近接サイトには一つの遺伝子だけ配位の異なる遺伝子型を置

く、これらの遺伝子型が作る超立方格子が遺伝子型空間である。たとえば  $N = 4$  の場合、全部で  $2^4 = 16$  の遺伝子型が存在し、 $(1, 1, 1, 1)$  は  $(0, 1, 1, 1)$ ,  $(1, 0, 1, 1)$ ,  $(1, 1, 0, 1)$ ,  $(1, 1, 1, 0)$  の 4 つの最近接遺伝子型を持つ。各遺伝子型は、表現型発現ダイナミクスを与える。発現した表現型は、それぞれ環境適応度を持つ。その適応度値を遺伝子型空間からの高さとし、その曲面を適応度地形と呼ぶ。遺伝子型空間と適応度地形を用いることで、進化とは適応度地形のピークに対応する遺伝子型を探して、遺伝子型空間をサーチするダイナミクスであると表現することができる。また表現型発現とは、遺伝子型空間から適応度地形へのマップである。

進化が起こるためには、適応度地形にはどのような構造が要求されるだろうか。Kauffman は様々な方法で遺伝子型に適応度値を割り振って適応度地形上を作り、その上で適応度のピークを探すことを試みた。まず出発点の最近接遺伝子型からランダムに 1 つの遺伝子型を選び、その適応度が出発点の適応度より高ければ、移動する。同じように、次の点の最近接遺伝子型からランダムに 1 つ選び、その遺伝子型の方が適応度が高ければ移動する、ということを繰り返す。このような進化ダイナミクスを行った結果、適応度ピークと適応度の谷がランダムに分布している適応度地形上では進化が不可能であったため、現実の進化は、近接サイトが近い適応度を持つような適応度地形、すなわち相関のある構造をした適応度地形上で起こると結論付けた [14][15]。

本研究において、スピンモデル上で進化を議論することにより、生物学的概念を統計物理の言葉で説明することを試みる。ここでは特に、ロバストネスという概念について考える。ロバストネスとは、系の損失や突然変異などの遺伝的揺らぎ、また表現型発現にかかる揺らぎを受けても機能を保持することができる性質を指す。例えば、代謝反応のネットワークが何らかの影響で欠損しても、機能が失われることはほとんどないことが知られている。また化学反応は揺らぐ環境下で行われるが、生物は機能を保つことができる。前者は遺伝子変異 (genetic noise) に対するロバストネス、後者はノイズ (epi-genetic noise) に対するロバストネスと呼ばれる。ロバストネスは進化により得ることの出来る特性であり、ランダムな遺伝子型には備わっていない。またロバストネスの進化は、表現型の揺らぎにより影響を受けることが、実験などから知られている。今回の研究で考慮する表現型発現過程のノイズは、遺伝的要因が全く作用しない epi-genetic noise である。二方向のロバストネスには正の相関があるとされている [11],[12]。表現型にかかるノイズを通して、変異に対するロバストネスがどのように変化するか、またそれが統計力学的にどのように説明されるのか、このモデルを用いて検証したい。

この論文の構成は以下の通りである。2 章でモデルの説明をする。3 章で数値計算によりモデルの振る舞いを見る。4 章で解析的な説明を試みる。5 章でまとめと今後の課題についてふれる。

## 2 Model

$N$  個の遺伝子を考える。各遺伝子の状態は  $\{S_i\}$  ( $i = 1, \dots, N$ ) で表す。全  $N$  個の遺伝子の配位を表現型とし、ベクトル  $\mathbf{S}$  で表す。 $S_i$  は  $\pm 1$  の二状態を取るスピンである。遺伝子型は、 $N$  個の遺伝子間の相互作用行列  $\{J_{ij}\}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ) の配位とし、ベクトル  $\mathbf{J}$  で表す。 $\{J_{ij}\}$  は全結合で対称な行列 ( $J_{ij} = J_{ji}$ ) とする。 $J_{ij}$  も簡単のため二状態をとるものとし、それぞれ  $\pm 1$  で表す。したがって相互作用の組は  $C_2^N$  組存在し、遺伝子型の状態数は  $2^{C_2^N}$  である。進化ダイナミクスでサーチする遺伝子型空間は最近接サイト数が  $C_2^N$  の、 $(C_2^N/2)$  次元超立方格子である。また適応度地形は、 $2^{C_2^N}$  の遺伝子型が作る適応度曲面である。

まず表現型  $\mathbf{S}$  の発現ダイナミクス、すなわち遺伝子型空間から適応度地形へのマップを設定する。ここでの設定はグラウバー模型に従う [16]。  $N$  スピンから成る系は、温度  $T_S$  の熱浴に接

している。  $T_S$  は表現型発現において環境から受けるノイズ強度を表す。各スピンは  $\pm 1$  の二状態を遷移する。その遷移確率は温度  $T_S$  の熱浴と、自分以外のスピンの状態によって与えられる。毎ステップ、あるスピンがランダムに選ばれ、状態遷移するか否かが確率的に決まる。1 ステップに1スピンの遷移を試行する場合、相互作用配位  $\mathbf{J}$ 、温度  $T_S$  の環境下での  $N$  スピンの確率分布関数  $P(\mathbf{S}|\mathbf{J}, T_S, \tau_S)$  は、次のマスター方程式で記述することができる。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\mathbf{S}|\mathbf{J}, T_S, \tau_S) = & - \sum_i w_i(S_i \rightarrow -S_i|\tau_S) P(\mathbf{S}|\mathbf{J}, T_S, \tau_S) \\ & + \sum_i w_i(-S_i \rightarrow S_i|\tau_S) P(\mathbf{S}^i|\mathbf{J}, T_S, \tau_S) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$\tau_S$  はスピン時間変数である。  $w_i(S_i \rightarrow -S_i|\tau_S)$  は、スピン  $S_i$  が時刻  $\tau_S$  において  $S_i$  から  $-S_i$  へ反転する確率を表している。また  $\mathbf{S}^i$  は、 $\mathbf{S}$  と比較して  $i$  番目のスピンのみが反転している状態である。ハミルトニアン

$$H(\mathbf{S}|\mathbf{J}) = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \quad (2.2)$$

を与えた場合、温度  $T_S$  での平衡状態は、カノニカル分布

$$P(\mathbf{S}|\mathbf{J}, T_S) = \frac{1}{Z_S(\mathbf{J}, T_S)} e^{-\beta_S H(\mathbf{S}|\mathbf{J})}, \quad Z_S(\mathbf{J}, T_S) = \text{Tr}_{\mathbf{S}} e^{-\beta_S H(\mathbf{S}|\mathbf{J})} \quad (2.3)$$

に収束する。ここで  $\beta_S = 1/T_S$  とした。詳細釣り合いの条件

$$w_i(S_i \rightarrow -S_i) P(\mathbf{S}|\mathbf{J}, T_S) = w_i(-S_i \rightarrow S_i) P(\mathbf{S}^i|\mathbf{J}, T_S) \quad (2.4)$$

を満たすようにダイナミクスを構成すれば、スピンはカノニカル分布で与えられる平衡状態へ収束する。(2.4)に従うと、遷移確率は

$$\frac{w_i(S_i \rightarrow -S_i)}{w_i(-S_i \rightarrow S_i)} = \exp \left[ 2 \sum_{j \neq i} J_{ij} S_j \right] \quad (2.5)$$

となる。この遷移確率を用いてマルコフ過程を構成し、これを表現型ダイナミクスとする。すなわち、スピン  $\mathbf{S}$  は遺伝子型  $\mathbf{J}$  が与えるハミルトニアンが作る自由エネルギーランドスケープの上で緩和する。緩和状態におけるスピン配位を、発現した表現型とする。一つの遺伝子型から唯一の表現型が決まるのではなく、(2.3)の分布に従い、温度  $T_S$  に対応する多様性を持っている。

次に、遺伝子型  $\mathbf{J}$  のダイナミクスを与える。遺伝子型の進化が起こるために必要なことは、発現した表現型に適応度の差があり、そこに淘汰がかかることである。その結果として、最も高い適応度を中心とし、淘汰圧を与える分散内の適応度を持つ個体が生き残り、遺伝子型が後世に伝わっていく。遺伝子型の進化の道筋を示す適応度は、表現型  $\mathbf{S}$  により与えられる関数である。表現型ダイナミクスの設定で、表現型  $\mathbf{S}$  は緩和後の配位であるとした。つまり表現型  $\mathbf{S}$  は遺伝子型  $\mathbf{J}$  の1ステップ内で緩和しており、時間スケールが完全に分離されている。遅い変数  $\mathbf{J}$  のダイナミクス内で、速い変数  $\mathbf{S}$  は統計平均を取り、消去する。この近似操作は、遺伝子型と表現型のダイナミクスのスケールの違いを表している。遺伝子の突然変異は一個体内でも頻繁に見られる現象であるが、実際に次の世代に伝わるのは一世代周期である。一方、表現型発現ダイナミクスは化学反応の時間スケールであるため、表現型のダイナミクスと遺伝子型のダイナミクスの時間スケールには大きな開きがある。また、この近似を使うことにより、クエンチ系の統計力学の手法を用いた解析を行うことができる。

スピンダイナミクスにおけるハミルトニアンのように、 $\mathbf{J}$  ダイナミクスの参照関数となるのは、適応度である。適応度は次式で定義する。

$$Fit(\mathbf{J}|T_S) = \left\langle \prod_{i < j \in t} \delta(S_i - S_j) \right\rangle = \text{Tr}_{\mathbf{S}} \prod_{i < j \in t} \delta(S_i - S_j) P(\mathbf{S}|\mathbf{J}, T_S) \quad (2.6)$$

$H(\mathbf{S}|\mathbf{J})$  は (2.2) で与えられるハミルトニアンである。 $t$  をターゲットベクトルと呼ぶ。ターゲットベクトルは任意の  $t$  個のスピンの index が作るベクトルである。これら  $t$  個のスピンをターゲットスピンと呼ぶ。スピン定常状態において、全スピンのうちターゲットスピンのみにかけた局所的拘束条件が満たされる割合として、適応度を定義した。 $\delta$  関数部分は、ターゲットベクトルが全て同じ値であれば +1、それ以外は -1 を取る。つまりターゲットスピンの配位が揃った状態を実現させやすい  $\mathbf{J}$  ほど適応度が高い。このターゲットが揃った配位を適応配位と呼ぶ。全スピンの表現型のうち、適応度に顕著に寄与しているのはターゲット部分の表現型である。淘汰に大きく影響するのはターゲット部分である。一方、ターゲット以外のスピンの影響は小さい。このように、論じている表現型に対して中立であるスピンを設け、中立スピン間の相互作用配位という、温度依存性が反映される冗長性をモデルに与えた。

スピンと同様に、グラウバー型のダイナミクスに従い、1 ステップに 1 つの  $J_{ij}$  の状態遷移を試行する。 $\mathbf{J}$  のマスター方程式は

$$\frac{d}{dt} P(\mathbf{J}|T_J, \tau_J) = - \sum_{i < j} w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij}|\tau_J) P(\mathbf{J}|T_J, \tau_J) + \sum_{i < j} w_{ij}(-J_{ij} \rightarrow J_{ij}|\tau_J) P(\mathbf{J}^{ij}|T_J, \tau_J) \quad (2.7)$$

で与えられる。 $w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij}|\tau_J)$  は時刻  $\tau_J$  で  $J_{ij} \rightarrow -J_{ij}$  に反転する確率を表し、配位  $\mathbf{J}^{ij}$  は、 $\mathbf{J}$  と比較して  $J_{ij}$  のみ反転した配位を表す。温度  $T_J$  の熱浴に接しているとする、遷移確率は他の相互作用の状態と、熱浴により与えられる。ここでの熱浴の意味とは、淘汰圧である。定常状態は、適応関数 (2.6) と  $T_J$  が与えるカノニカル分布

$$P(\mathbf{J}, T_S, T_J) = \frac{1}{Z_J(T_S, T_J)} e^{\beta_J Fit(\mathbf{J}, T_S)}, \quad Z_J(T_S, T_J) = \text{Tr}_{\mathbf{J}} e^{\beta_J Fit(\mathbf{J}, T_S)} \quad (2.8)$$

に収束する。詳細釣り合いの条件

$$\frac{w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij})}{w_{ij}(-J_{ij} \rightarrow J_{ij})} = \frac{e^{\beta_J Fit(\mathbf{J}^{ij})}}{e^{\beta_J Fit(\mathbf{J})}} \quad (2.9)$$

を満たす遷移確率によりマルコフ過程を構成し、これを  $\mathbf{J}$  の進化ダイナミクスとする。1 ステップに 1 つの  $J_{ij}$  の状態遷移が試行され、遷移確率は  $w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij})$  であるので突然変異率は  $1/C_2^N \times w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij})$  である。 $w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij}) \leq 1$  であるので、突然変異率は最大でも  $1/C_2^N$  である。Eigen が示したように高い突然変異率での進化は error catastrophe に陥る可能性がある [17]。また 1 つの  $J_{ij}$  あたりの突然変異率が低い値で固定されていても、 $N$  が大きい場合は error catastrophe に陥る可能性が高い。そこで、 $N$  に依らずに最大でも 1 つの  $J_{ij}$  だけが変異する、歩幅 1 の遺伝子型空間のサーチとした。以上の設定を模式的に図 1 に示す。

### 3 数値計算の結果と考察

#### 3.1 適応度とエネルギーの振る舞い

まずは様々な  $T_S, T_J$  でのモデルの振る舞いを観察するため、スピン数  $N = 15$ 、ターゲット数  $t = 3$  として数値計算を行った。スピンダイナミクス、 $\mathbf{J}$  ダイナミクスともメトロポリスモ

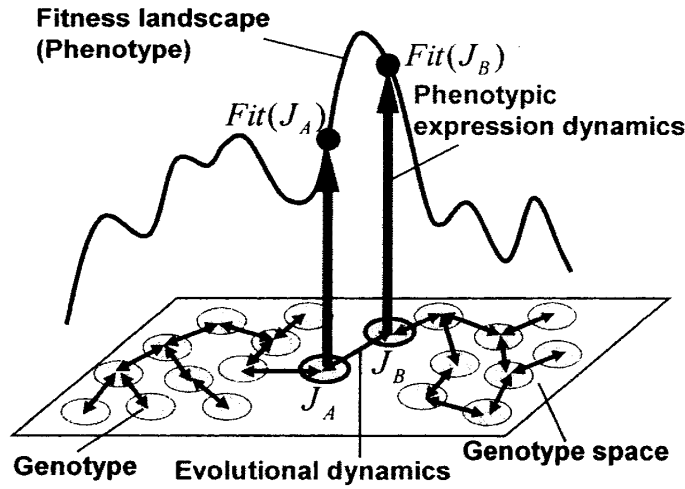


図 1: 遺伝子型空間と適応度地形の図. 遺伝子型空間を構成する格子点は遺伝子型 ( $J$  の配位) に対応している. 最近接に存在する二つの遺伝子型  $J_A, J_B$  が与える自由エネルギー上で温度  $T_S$  でモンテカルロシミュレーションを行い, 適応度  $Fit(J_A), Fit(J_B)$  を得る.  $J_A, J_B$  のどちらが生き残るかは,  $Fit(J_A)$  と  $Fit(J_B)$  と淘汰圧  $T_J$  で決まる.

ンテカルロ法を用いた. 特にスピンドイナミクスについては, 効率よく適応度を測る必要があるため, 交換モンテカルロ法を用いた [18]. 遷移確率は, それぞれ詳細釣り合の条件を満たすように与える.

$$w_i(S_i \rightarrow -S_i) = \min(1, 2 \exp[\beta_S \sum_j J_{ij} S_j]) \quad (3.1)$$

$$w_{ij}(J_{ij} \rightarrow -J_{ij}) = \min(1, \exp[\beta_J (Fit(J) - Fit(J^{ij}))]) \quad (3.2)$$

$J^{ij}$  は  $J$  のうち  $J_{ij}$  のみが反転した配位を表す. これらの設定のもと, 適応度 (3.3) とエネルギー (3.4) の  $T_S, T_J$  依存性を観察した.

$$[Fit](T_S, T_J) = \text{Tr} P(J|T_J) Fit(J|T_S) \quad (3.3)$$

$$[E](T_S, T_J) = \text{Tr} P(J|T_S, T_J) E(J, T_S) = \text{Tr} P(J|T_S, T_J) \text{Tr}_S H(S|J) P(S|T_S, J) \quad (3.4)$$

$P(S|T_S, J)$ ,  $P(J|T_S, T_J)$  はそれぞれ (2.3), (2.8) であり, (3.3), (3.4) とともにスピン,  $J$  に関して二重平均された物理量である. 温度依存性について触れておくと,  $T_J$  は淘汰圧, つまり分布の幅を決めるパラメータであったので,  $J$  の分布関数が  $T_J$  依存性を持つ. 適応度, エネルギーとも  $J$  平均を取ることで  $T_J$  依存性を持つようになる. 一方,  $T_S$  依存性は, スピン平均を取ることで生まれる. 図 2 に, 適応度とエネルギーの  $T_S, T_J$  依存性を示す.  $x$  軸方向にスピン温度  $T_S$ ,  $y$  軸方向に  $T_J$  をとり,  $z$  軸方向に適応度またはエネルギーとした.

適応度は,  $T_S, T_J$  の単調減少関数である.  $T_J$  が上昇すると適応度は下がるが, その下がり方は  $T_S$  によって異なる.  $T_S$  が低温の場合,  $T_J$  を上昇させても高い適応度を保つことができるが,  $T_S$  が高い場合は,  $T_J$  上昇に対して連続的に適応度を下げる.

一方, エネルギーは非単調な振る舞いを見せる. まず  $T_S, T_J$  低温領域には等エネルギー面が形成される.  $T_S$  を上昇させると  $T_J$  によりエネルギーが下がる場合とエネルギーが上がる場合が見られる.  $T_J$  高温領域では,  $T_S$  上昇に従ってエネルギーは緩やかに上昇していく. しかし  $T_J$  低温領域では,  $T_S$  を上昇させていくと  $T_S \sim 2.0$  付近でエネルギーが急激に下がり, その後

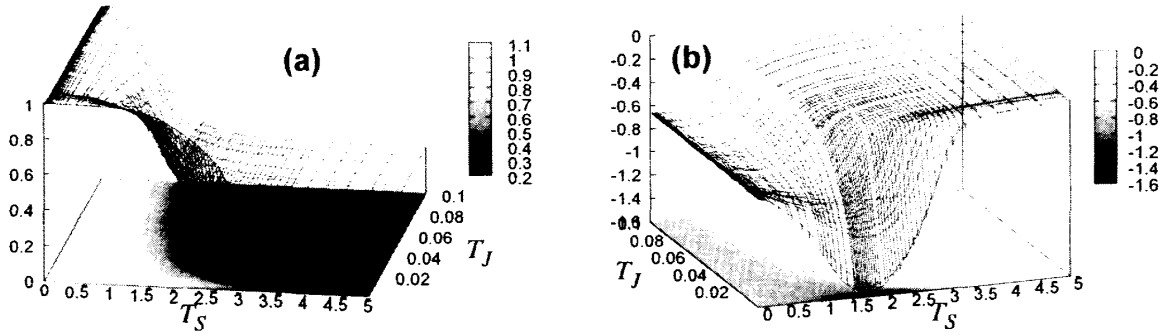


図 2: (a): 適応度の  $T_S$ ,  $T_J$  依存性.  $T_S, T_J$  の単調減少関数である.  
 (b): エネルギーの  $T_S$ ,  $T_J$  依存性.  $T_S$  を上昇に対し, エネルギーは  $T_J$  低温では下がり,  $T_J$  高温では上がる.

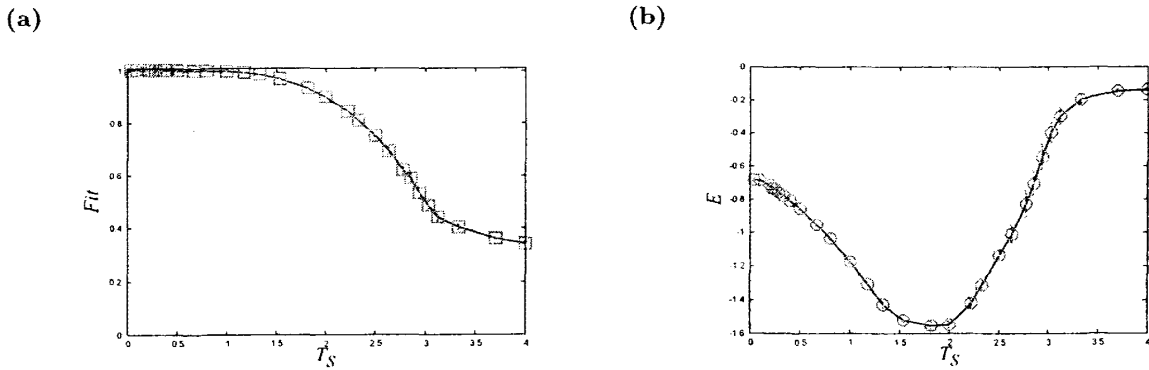


図 3:  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  での適応度とエネルギーの  $T_S$  依存性. (a) に適応度, (b) にエネルギーを示す.

再び上昇するという非単調性が見られる. この非単調性は通常の熱力学では見られない現象であり, ある温度領域では負の比熱を持つことがわかる. このような非単調な振る舞いは,  $T_J$  低温の場合のみに観察されるため, 以下の議論は主に  $T_J$  を低温で止め,  $T_S$  を動かした場合の系の振る舞いの変化を調べる. そこで  $T_J$  を十分低い温度 ( $= 0.5 \times 10^{-3}$ ) で止めた場合の, 適応度とエネルギーの変化を  $T_S$  依存性を図 3 にプロットする. これは図 2 を  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  平面で切った図に対応している.

$T_J$  低温,  $T_S \sim 2.0$  の領域では, 高い適応と低いエネルギー状態が同時に実現していることがわかった. すなわち, 適応配位が低いエネルギー状態に対応するような  $J$  が選択的に存在していると考えられる. また, 適応条件はターゲットという局所的部位に課しているにもかかわらず, 全スピンの関数であるエネルギーに非単調な振る舞いが見られることから, 全スピンの協同的な振る舞いと局所的適応の関連性が示唆されている. このような  $J$  はどのような仕組みで選択されたのか. またそれが有限  $T_S$  で見られるのは何故か. 以下の章で詳しく考えていく.

### 3.2 $J$ の構造

本節では  $J$  の温度依存性を特徴づけるパラメータを設定することにより,  $T_S \sim 2.0$  で見られたエネルギーの減少について考察してみる. まずターゲットスピンという特別なスピンが存在することにより, 進化の過程で相互作用  $J_{ij}$  にかかるバイアスは一様ではないと考えられる. そこで  $J$  を, ターゲットスピン間の相互作用  $\{J_{ij}\} (i, j \in t) \equiv J_u$  と, ターゲットとターゲット以外のスピン間の相互作用  $\{J_{ij}\} (i \in t, j \notin t) \equiv J_{to}$ , ターゲット以外のスピン間の相互作用



$\{J_{ij}\} (i, j \notin t) \equiv J_{oo}$  という3種類の  $J_{ij}$  に分ける.  $\mathbf{J} = \{\mathbf{J}_{tt}, \mathbf{J}_{to}, \mathbf{J}_{oo}\}$  である. 適応を獲得しつつ, エネルギーも下げるために, 3種類の  $J_{ij}$  が満たすべき条件を考える.

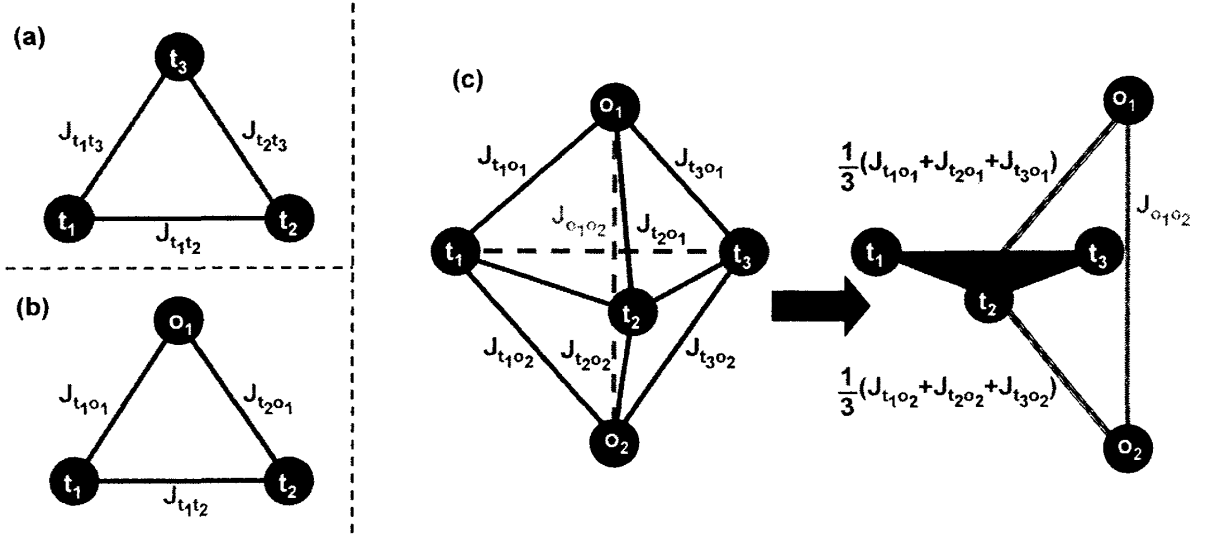


図4: ターゲットスピン  $S_{t_1}, S_{t_2}, S_{t_3}$  と, ターゲット以外のスピン  $S_{o_1}, S_{o_2}$  の相互作用.

(a): 3つのターゲットが作る三角形.  $J_{t_1t_2} = J_{t_2t_3} = J_{t_1t_3} = 1$  であれば, 安定にターゲットスピンの配位が揃う.

(b):  $S_{t_1}, S_{t_2}$  と  $S_{o_1}$  の作る三角形.  $J_{t_1o_1} \times J_{t_2o_1} = 1$  なら安定.

(c): 3つのターゲットと2つのターゲット以外のスピンが作る六面体. ターゲットととの  $t$  本の相互作用を一本の相互作用で表し, その相互作用と  $J_{o_1o_2}$  の作る三角形にフラストレーションがなければ安定.

まずターゲットスピン間の相互作用  $\mathbf{J}_{tt}$  が強磁性相互作用であれば, ターゲット間が揃うことでエネルギーは低くなる (図4(a)). そこで,  $\mathbf{J}_{tt}$  が +1 を取る割合を表す次の量を定義する.

$$\Phi_1(T_S, T_J) = \frac{2}{t(t-1)} \left[ \sum_{i < j \in t} J_{ij} \right] \quad (3.5)$$

$[\dots]$  は  $\mathbf{J}$  の分布 (2.8) による平均, 係数は組み合わせの数を表す. ターゲット間相互作用が強磁性相互作用であれば, (3.5) は 1 に近い値を取る.  $\Phi_1$  は, ターゲット間の直接的な相互作用のエネルギー的安定性 (フラストレーションの有無) を示すので, 1st order effect と呼ぶ.

次に, ターゲットとターゲット以外のスピン間の相互作用  $\mathbf{J}_{to}$  の配位を考える. ターゲットスピンのうち2つ ( $S_{t_1}, S_{t_2}$ ) と, ターゲット以外のスピンの1つ ( $S_{o_1}$ ) で作る三角形を考える.  $S_{o_1}$  と  $S_{t_1}, S_{t_2}$  との相互作用に  $J_{t_1o_1} \times J_{t_2o_1} = 1$  の関係があれば, 三角形をフラストレートさせることなく  $S_{t_1}$  と  $S_{t_2}$  は揃うことができる (図4(b)). そこで, 次の量を定義する.

$$\Phi_2(T_S, T_J) = \frac{1}{l(N-l)} \left[ \sum_{i < j \in t} \sum_{k \notin t} J_{ik} J_{jk} \right] \quad (3.6)$$

$\Phi_2$  が 1 に近い値を取るときは, ターゲット以外のスピン  $k$  もターゲットが適応配位を実現する協力をしている.  $\Phi_2$  は, 1つのターゲット以外のスピンを挟み, 2本の相互作用を介してターゲットを安定に揃える効果を表すので, 2nd order effect と呼ぶ.

さらにターゲット以外のスピン間の相互作用  $\mathbf{J}_{oo}$  を考える. ターゲット以外のスピン  $S_{o_1}$  は全ターゲットと相互作用しているので,  $\mathbf{J}_{to}$  タイプの相互作用を全部で  $t$  本持つ.  $\Phi_2$  の値が示すことは,  $t$  本の  $\mathbf{J}_{to}$  のうちの2本が揃っているかどうかであり,  $t$  本全ての配位は分からない. そこでまず,  $S_{o_1}$  が持つ  $l$  本の  $\mathbf{J}_{to}$  相互作用を一本の相互作用  $\frac{1}{l} \sum_{i \in t} J_{o_1, i}$  で表し, ターゲットの

作る平面と、この重みで相互作用をしていると考える。同様に、 $S_{o_2}$  とターゲット間の  $t$  本の相互作用を、一本の相互作用  $\frac{1}{t} \sum_{i \in t} J_{o_2, i}$  で表す。 $J_{o_1 o_2}$  の取るべき配位は、これらの相互作用と作る三角形にフラストレーションを与えない配位である。そこで次の量を定義する。

$$\Phi_3(T_S, T_J) = \frac{2}{(N-t)(N-t-1)} \left[ \sum_{k < l \notin t} \left( \frac{1}{t} \sum_{i \in t} J_{ik} \right) J_{kl} \left( \frac{1}{t} \sum_{j \in t} J_{jl} \right) \right] \quad (3.7)$$

二つのターゲット以外のスピン  $o_1, o_2$  間の相互作用は、(3.7) を 1 に近づける配位を取れば、ターゲットを安定に揃える効果を持つと考えられる。すなわち、 $J_{o_1 o_2}$  は、 $o_1$  と 3 つのターゲットが作る四面体での dominant な相互作用と、 $o_2$  と 3 つのターゲットが作る四面体での dominant な相互作用に協力する配位を取ればエネルギー的に安定である (図 4(c))。 (3.7) は、3 本の相互作用を介してターゲットを安定に揃える効果を表すので、3rd order effect と呼ぶ。これらの  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ ,  $\Phi_3$  の温度依存性の結果をそれぞれ図 5 に示す。また特にエネルギーの低い領域での  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  を見るため、図 3 同様に、 $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  での  $T_S$  依存性を同時に示す。

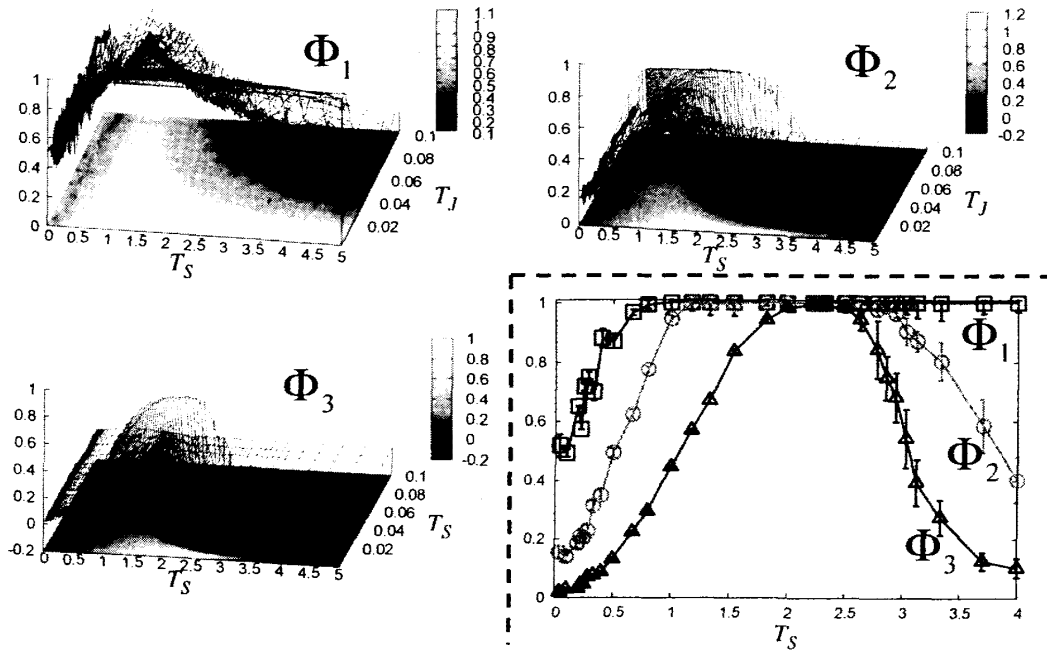


図 5:  $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  の  $T_S, T_J$  依存性. 右下の図は  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  での  $\Phi_1$  ( $\square$ ),  $\Phi_2$  ( $\circ$ ),  $\Phi_3$  ( $\triangle$ ) の  $T_S$  依存性.

図 3.(b) でエネルギーの減少が見られた  $T_S \sim 2.0$  近傍で、 $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  が全て最大値をとっていることがわかる。  $T_S$  を上昇させると、まず  $J_{tt}$  が全て +1 をとるようになり、その後  $J_{to}$  がターゲットを助ける配位をとり、さらに  $J_{oo}$  もターゲットを助ける配位をとる。  $T_S \sim 2.0$  で、 $J_{tt}, J_{to}, J_{oo}$  の全てがターゲットを安定に揃える配位をとっている。

ここで、次の量を考えてみる。

$$\Phi'_2 = \frac{1}{N(N-t)} \left[ \sum_{i \in t, j \notin t} J_{ij} \right], \quad \Phi'_3 = \frac{2}{(N-t)(N-t-1)} \left[ \sum_{i < j \notin t} J_{ij} \right] \quad (3.8)$$

これらは  $\Phi_2, \Phi_3$  とは異なり、 $J_{to}, J_{oo}$  の単純和である。  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  における、これらの  $T_S$  依存性を図 6 に示す。  $\Phi_2, \Phi_3$  とは異なり、(3.8) は、どの  $T_S$  においても 0 のまわりで揺らいでいる。このように  $J_{to}, J_{oo}$  の  $T_S$  依存性は、 $\Phi'_2, \Phi'_3$  では観測できないが、 $\Phi_2, \Phi_3$  だと観測できる

ことがわかる．一方で  $J_{ii}$  の温度依存性は  $\Phi_1$  で観測することができ，特に中間温度の  $T_S$  では最大値を取った．これらの結果は，Hopfield の連想記憶モデルと関連付けて理解することができる [19],[20]．

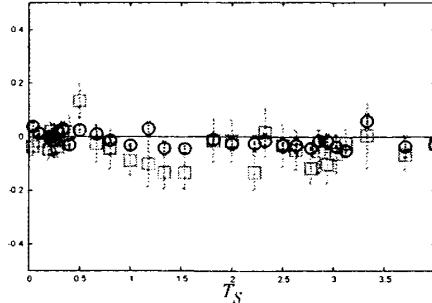


図 6:  $\Phi_2$ (□) と  $\Phi_3$ (○) の  $T_S$  依存性．中央の線は 0 を示す．

Hopfield model の連想記憶モデルは，発火 (+1)，非発火 (-1) の二状態を取る  $N$  個のニューロンのネットワーク  $\{S_i\}$  に，Hebb 則を用いて  $p$  個の  $N$  次元ベクトルのパターン  $\{\xi_i^\mu\}$  ( $\mu = 1, \dots, p$ ) を記憶させ，それらを想起させる問題である．Hebb 則では，相互作用行列  $\{J_{ij}\}$  は  $J_{ij} = \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu$  のように与えられる．この  $J$  が作る自由エネルギーの global または local minimum は，記憶させたパターンに対応している． $N$  個のニューロンは時間発展の結果，初期条件から最も近いアトラクタに落ち，アトラクタに対応するパターンを想起する．埋め込む記憶パターンが有限個の場合は，臨界温度以下での安定な想起が実現するが， $p = \alpha N$  ( $\alpha \gtrsim 0.14$ ) だと，記憶させたパターンがスピングラス的自由エネルギー地形を作り，想起に失敗することが知られている．特に  $p = 1$  とし，その 1 つのパターンを想起した状態を Mattis state と呼ぶ． $p = 1$  であるため，一つの global minimum が存在し，Mattis state にはフラストレーションが無い．

すなわち，ある特定のパターン (ただし  $\sum_i S_i \neq 0$ ) を埋め込んだ  $J$  を多数用意し，それら  $J_{ij}$  の和を計算すると，有限の値を取ることは明らかである．進化させた  $J$  の，ターゲット間  $J_{ij}$  の和である  $\Phi_1$  は  $T_S$  中間温度では有限の値をとるが，その他の  $J_{ij}$  の和 ( $\Phi_2, \Phi_3$ ) は 0 であることから，ターゲット以外の部分には特定のパターンが埋め込まれていないことがわかる．

まとめると， $T_S \sim 2.0$  での分布  $P(J|T_S, T_J)$  に従って分布する  $J$  群のターゲット間相互作用  $J_{ii}$  には，適応配位という共通のパターンが埋め込まれている．したがってスピンの適応配位をとった場合，ターゲット部分に関してはフラストレーションは 0 である．一方， $J_{io}, J_{oo}$  にはそのような一意的構造は存在しない．代わりにフラストレーションが少ないという特徴を持ち，ターゲット部分の安定な想起をサポートしている．このような  $J$  が実現していることにより， $T_S$  中間温度では適応と同時にエネルギーが下がるという結果が得られていたことがわかる．

最後に，「ある中間温度で進化させた  $J$  にはフラストレーションが少ない」という現象は，ターゲットのパターンに依存しないことを注記しておく．ここまで，ターゲットの適応パターンを  $S_{i_1}, S_{i_2}, S_{i_3} = (1, 1, 1)$  としていたが，別の配位を適応パターンとする場合は， $J$  をゲージ変換し， $\Phi_1 \sim \Phi_3$  を定義し直すことで同様の議論が可能である．

### 3.3 緩和ダイナミクスの温度依存性

ここまで定常状態の性質を観察してきたが、本節では緩和のダイナミクスを考えてみる。 $T_J$  は十分低温で固定して ( $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$ ),  $T_S$  のノイズ環境下で適応した  $\mathbf{J}$  を  $\mathbf{J}^{adp}(T_S)$  と表記しておく。 $\mathbf{J}^{adp}(T_S)$  とは、温度  $T_S$  で、スピンのエルゴード性が破れていない場合に適応できる  $\mathbf{J}$  であると解釈することができる。

この  $\mathbf{J}^{adp}(T_S)$  上でのスピンの緩和ダイナミクスを観察するわけであるが、適応度というもの、平衡状態に行きついた後に時間平均をとる物理量であるので、横軸をスピン時間 (モンテカルロステップ) としてプロットすることができない。そこで代わりに等価な物理量として target magnetization

$$m_t = \left| \frac{1}{t} \sum_{i \in t} S_i \right| \quad (3.9)$$

を導入し、その時間発展を観察する。 $t = 3$  の場合、 $m_t$  は二値をとる変数であり、適応配位が実現しているときは  $m_t = 1$ 、そうでない場合は  $m_t = 1/3$  である。

特にフラストレーションが多い領域と少ない領域を比較するため、 $\mathbf{J}^{adp}(T_S = 10^{-3})$  と  $\mathbf{J}^{adp}(T_S = 2.0)$  上での緩和ダイナミクスを観察する。その際のスピン温度は、共通の極低温スピン温度  $T'_S = 10^{-5}$  とした。これは、 $\mathbf{J}^{adp}(T_S)$  の構造を際立たせる目的がある。初期条件と  $\mathbf{J}^{adp}(T_S)$  に関する平均を  $\langle \langle \dots \rangle \rangle$  と表記し、平均化した  $\langle \langle m_t \rangle \rangle$  の時間変化を調べた (図 7)。

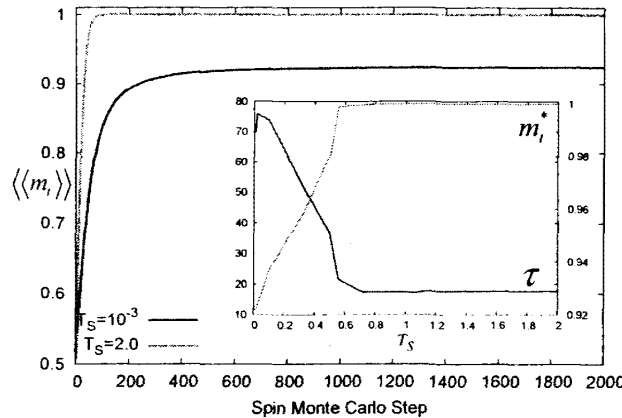


図 7:  $\langle \langle m_t \rangle \rangle$  の  $\mathbf{J}^{adp}(T_S)$  上での時間発展。  $T_S = 10^{-3}$  と  $T_S = 2.0$  の場合を示している。inset は、 $\langle \langle m_t \rangle \rangle$  を (3.10) でフィッティングしたときの緩和時間  $\tau$  と収束値  $m_t^*$  の温度依存性。左の軸は  $\tau$  に、右の軸は  $m_t^*$  にそれぞれ対応している。

その結果、 $T_S = 2.0$  で適応した  $\mathbf{J}$  上でのダイナミクスは緩和が早く、また収束値が高い。一方で、 $T_S = 10^{-3}$  で適応した  $\mathbf{J}$  上でのダイナミクスは、 $T_S$  中間温度と比較して遅く、また収束値も低い。そこで様々な  $\mathbf{J}(T_S)$  でのダイナミクスを観察し、 $\langle \langle m_t \rangle \rangle$  を

$$\langle \langle m_t \rangle \rangle = m_t^* + c \exp[-t/\tau] \quad (3.10)$$

でフィッティングし、緩和時間  $\tau$  と収束値  $m_t^*$  を見積もった。その結果を図 7 に同時に示した。収束値  $m_t^*$  は  $T_S$  低温で低くなり、緩和時間  $\tau$  は  $T_S$  低温で長くなる。これは、 $T_S$  低温では初期条件依存性が残っていることが原因である。ある初期条件によっては、長い間適応できない local

minimum にトラップされてしまい、平均適応度も下がる\*。  $J^{adp}(T_S = 10^{-3})$  上では、 $T'_S$  のスピンは最大適応度を獲得できない。すなわち  $J^{adp}(T_S)$  はスピングラス的地形になっていることがわかる。一方、 $J^{adp}(T_S = 2.0)$  は、 $T'_S$  という極低温のスピンでも最大適応度を獲得できる。これは  $J^{adp}(T_S = 2.0)$  のエネルギー地形がスムーズで、あらゆる初期条件から簡単に緩和できることを表している。

前節の結果とまとめると、 $T_S$  低温での適応  $J$  にはフラストレーションが多く存在し、またエネルギー地形はスピングラス的である。一方  $T_S$  中間温度での適応  $J$  にはフラストレーションが存在せず、スムーズなランドスケープであることが明らかになった。

### 3.4 変異に対するロバストネス

前節の結果から、 $T_S$  低温、 $T_S \sim 2.0$  で実現している  $J$  の、配位に関する性質と、エネルギー地形に関する性質を得ることができた。本節では、これらの  $J$  が遺伝子型の変異に対してどのような応答を示すかを検証し、ロバストネスについて議論する。

本モデルにおいて変異とは、 $J$  の配位をランダムにフリップさせることに対応する。 $J^{adp}(T_S)$  に突然変異率  $\mu$  で変異を与え、変異遺伝子型  $J^{adp}(T_S, \mu)$  を得、極低温環境下 ( $T'_S = 10^{-5}$ ) で、変異遺伝子型の適応度 (すなわち  $Fit(J^{adp}(T_S, \mu)|T'_S)$ ) を測ることで、 $J^{adp}(T_S)$  の変異に対するロバストネスを観察する。この際、表現型発現にかかるノイズを極力消し、変異による影響のみを取り出す狙いで極低温スピンを用いている。低温を代表して  $T_S = 10^{-4}$  と、中間温度を代表して  $T_S = 2.0$  の  $J^{adp}(T_S)$  をそれぞれ 150 サンプル用意し、変異  $J$  の適応度を観察した。図 8 に、150 サンプルの  $Fit(J^{adp}(T_S, \mu)|T'_S)$  の平均値の  $\mu$  依存性を示す。

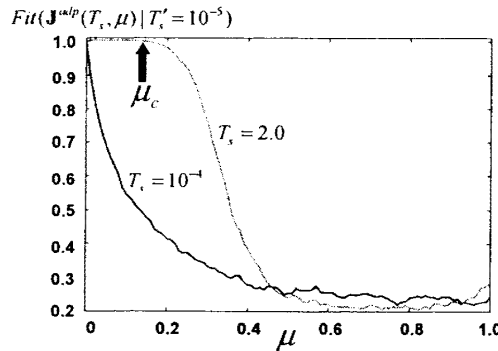


図 8: 突然変異率  $\mu$  で変異を与えられた  $J^{adp}(T_S, \mu)$  の、 $T'_S = 10^{-5}$  における適応度。適応度が 1 から下り始める突然変異率を  $\mu_c$  と定義する。

$J(T_S = 10^{-4})$  の適応度は、少しでも変異が入ると下がり始める。一方  $T_S = 2.0$  では、突然変異率がある閾値  $\mu_c$  を超えたところで適応度が下がり始める。 $\mu_c$  以下の突然変異率では、適応度は変異の影響を全く受けずに、最大の適応度を保つことができる。そこで、 $\mu_c$  の  $T_S$  依存性を調べた。 $\mu_c$  の値とフラストレーションの有無の関係を明らかにするため、図 9(a) に、 $\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3$  と  $\mu_c$  を同時にプロットした。 $T_S$  低温では  $\mu_c = 0$  であるが、 $T_S$  中間温度では  $\mu_c$  は有限の値を取る。さらに  $T_S$  を上昇させると、 $\mu_c$  は再び 0 になる。 $\mu_c$  が有限である温度領域は、特にター

\*  $T_S$  低温で緩和時間が非単調になっているのも、これが原因である。初期条件によっては長い間適応度の低い local minimum にトラップされることになるため、指数緩和よりも遅い緩和を見せ、フィッティング関数 (3.10) が適切でなくなる。またそのような local minimum にトラップされる初期条件の割合は、 $m_l$  が 1 と  $1/3$  をとる二値変数であることを考えれば、図 7 から見積もることができる。

ゲット近傍のフラストレーションが0(2nd order effect  $\Phi_2 = 1$ )の領域と対応していることがわかる．そこで  $\Phi_2$  が最大値1をとる温度領域を  $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  と定義する (図9(a)).

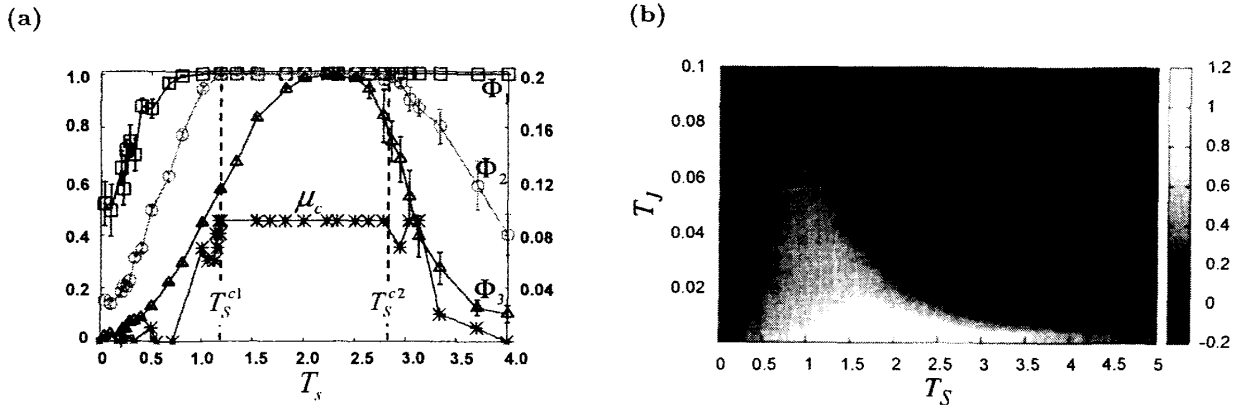


図9: (a):  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  における,  $\mu_c$  とフラストレーションのパラメータの  $T_S$  依存性. □は  $\Phi_1$ , ○は  $\Phi_2$ , △は  $\Phi_3$ , \*は  $\mu_c$ .

(b): ターゲット周りのフラストレーション (2nd order effect,  $\Phi_2$ ) の  $T_S$ ,  $T_J$  依存性. 色の明るい領域が, local Mattis state の得られる温度領域である.

$T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  では  $\Phi_2$  は1であるが  $\Phi_3$  は  $T_S \sim 2.0$  を除き, 厳密に1ではない.  $\Phi_1 = \Phi_2 = 1$ ,  $\Phi_3 \neq 1$  である  $J$  とは, ターゲットとその周囲の相互作用 ( $J_{tt}, J_{to}$ ) には, フラストレーションが存在していないが,  $J_{oo}$  間に有限のフラストレーションが存在している  $J$  である. このような  $\Phi_1 = \Phi_2 = 1$  である  $J$  を local Mattis state と定義する. 特に  $\Phi_3$  の場合は Mattis state である. local Mattis state は変異に対してロバストであることがわかった.

最後に, local Mattis state の実現する温度領域  $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  の  $T_J$  依存性について議論する. ここまで  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  で固定した場合の  $T_S$  依存性を観察してきたが, 一般の  $T_J$  における  $T_S^{c1}, T_S^{c2}$  を見積もるため, 図9(b)に  $\Phi_2$  の値を  $T_S, T_J$  平面上にプロットする\*. その結果,  $T_J$  を上昇させると, local Mattis state の得られる温度領域が狭くなり,  $T_J \gtrsim 0.05$  では local Mattis state が存在しないことがわかる.

以上をまとめると,  $T_J \lesssim 0.05$  では,  $T_S^{c1}, T_S^{c2}$  を用いて  $J$  の相を分けることができる. ノイズ強度の弱い環境下 ( $T_S \leq T_S^{c1}$ ) で適応した  $J$  にはフラストレーションが多く存在し, rugged なエネルギー地形を持ち, 変異に対して不安定である. この相はスピングラス相に対応していると考えられる. 一方, ノイズ強度のやや強い環境下 ( $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$ ) で進化すると, local Mattis state と呼ばれる, 変異に対してロバストな  $J$  を得ることができる. この  $J$  にはフラストレーションが無く, またスムーズなエネルギー地形を持つ. またノイズが強すぎる場合 ( $T_S \geq T_S^{c2}$ ) は適応できない. この相は常磁性相に対応していると考えられる.

このように, ターゲットを基準としたフラストレーションで  $J$  を特徴づけることにより, ノイズに対してロバストである, local Mattis state という特徴的遺伝子型を定義することができた. また local Mattis state を基準にすることで,  $T_S^{c1}, T_S^{c2}$  を用いて,  $J$  の相を議論することができた. 一方, なぜ local Mattis state が  $T_S$  有限温度で得られるのか, という問いに対してはこの段階ではまだ答えられていない. そこで次の章では,  $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  でロバストな local Mattis state を獲得できる仕組みを, 解析計算から探してみる.

\*図9(a)の  $\Phi_2$  は, 図9(b)の  $T_J = 0.5 \times 10^{-3}$  平面を切り出したものである.

#### 4 解析計算による説明 —適応度地形の構造—

スピン温度  $T_S^{\text{cl}} \leq T_S \leq T_S^{\text{g}^2}$  で進化した  $\mathbf{J}$  はなぜロバストであるのか、またなぜ有限温度であるのか、その理解のためには適応度地形の構造を把握することが必要である。本章では Mattis state および local Mattis state と、その近傍の  $\mathbf{J}$  の適応度の  $T_S$  依存性を解析的に調べることで、これらの問題に答えることを目指す。

まず4.1節で強磁性体の適応度を求める。そして強磁性体から、全ての Mattis state ( $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3$ ) の配位と適応度が得られることを4.2節で示す。またその他の  $\Phi_3 \neq 1$  の local Mattis state の適応度が、強磁性体の適応度から得られることを4.4節で示し、導出する。また  $\Phi_1, \Phi_2 \neq 1$  である  $\mathbf{J}$  の適応度も導出し、最後に適応度地形の構造について説明する。

##### 4.1 強磁性体の適応度

Mattis state とは、フラストレーションのパラメータ  $\Phi_1 \sim \Phi_3$  が全て1をとる  $\mathbf{J}$  配位である。この条件を満たす  $\mathbf{J}$  のうち、もっとも簡単なものは強磁性体である。そこでまず強磁性体の適応度を求めてみる。

$\mathbf{J}$  の第  $n$  励起状態の状態数を  $W(E_n(\mathbf{J}))$ 、そのうち適応条件を満たす配位数を  $W_f(E_n(\mathbf{J}))$  と定義すると、適応度 (2.6) は、次のように表すことができる。

$$Fit(\mathbf{J}|T_S) = \frac{\sum_n W_f(E_n(\mathbf{J})) e^{-\beta_S E_n(\mathbf{J})}}{\sum_n W(E_n(\mathbf{J})) e^{-\beta_S E_n(\mathbf{J})}} \equiv \frac{Z_f(\mathbf{J})}{Z(\mathbf{J})} \quad (4.1)$$

適応度を求めるには、 $Z_f(\mathbf{J}), Z(\mathbf{J})$  を求めなくてはならない。 $Z(\mathbf{J})$  は分配関数である。強磁性体を  $\mathbf{J}^0$  と表記すると、強磁性体の適応度を得るためには  $Z_f(\mathbf{J}^0), Z(\mathbf{J}^0)$  を知る必要がある。そこで、local Mattis state の解析の第一歩として、これらを求めてみる。

##### 4.1.1 強磁性 $\mathbf{J}$ の分配関数

$\mathbf{J}^0$  の分配関数を求めるためには  $\mathbf{J}^0$  の与えるエネルギー準位  $E_n(\mathbf{J}^0)$  とその縮退度  $W(E_n(\mathbf{J}^0))$  を得る必要がある。 $\mathbf{J}^0$  の基底状態に対応するスピン配位は、全てのスピンの方向が揃う配位である\*。相互作用は全結合であるので、この配位の与える基底エネルギーとその縮退度は、

$$E_0(\mathbf{J}^0) = -C_2^N, \quad W(E_0(\mathbf{J}^0)) = 1 \times 2 \quad (4.2)$$

である。ここでハミルトニアン (2.2) の係数  $1/\sqrt{N}$  は省略した。

全スピンが揃っている配位からスピンを一本ずつ反転させていくと、エネルギーは上昇する。第  $n$  励起状態に対応する配位は、 $N$  スピンのうち  $n$  スピンが反転している配位と、その  $Z_2$  対称な配位である。エネルギー準位と縮退度は、それぞれ

$$E_n(\mathbf{J}^0) = E_0(\mathbf{J}^0) + 2(N-n)n, \quad W(E_n(\mathbf{J}^0)) = C_n^N \times 2 \quad (4.3)$$

で与えられる。(4.2) と同じく、ハミルトニアンの係数  $1/\sqrt{N}$  は省略した。 $n$  には上限  $n_{\max}$  が存在する。 $N$  が偶数の場合、 $N$  本中  $N/2$  本が反転しているスピン配位が最大励起状態を与える。ただし、その  $Z_2$  対称な配位も自分自身であるので、

$$W(E_{n_{\max}}) = C_{n_{\max}}^N, \quad n_{\max} = N/2 \quad \text{for } N \text{ even} \quad (4.4)$$

\* 全スピンの +1、あるいはその  $Z_2$  対称な配位である。全スピンの -1 という配位である。

となる。  $N$  が奇数の場合は、  $N$  本中  $(N-1)/2$  本が反転する配位が最大励起状態を与える。その  $Z_2$  対称な配位は  $N$  本中  $(N+1)/2$  本が反転する配位である。よって  $N$  が偶数と奇数の場合で最大励起状態の縮退度が異なり、

$$W(E_{n_{\max}}) = C_{n_{\max}}^N \times 2, \quad n_{\max} = (N-1)/2 \quad \text{for } N \text{ odd} \quad (4.5)$$

となる。これらをまとめると、エネルギー準位と縮退度を用いた  $\mathbf{J}^0$  の分配関数の表記を得ることができる。

$$Z(\mathbf{J}^0) = \begin{cases} 2e^{\beta C_2^N} \sum_{n=0}^{n_{\max}} C_n^N e^{-2\beta(N-n)n} & \text{for } N \text{ odd, } n_{\max} = \frac{N-1}{2} \\ e^{\beta C_2^N} \left( 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}-1} C_n^N e^{-2\beta(N-n)n} + C_{n_{\max}}^N e^{-2\beta(N-n_{\max})n_{\max}} \right) & \text{for } N \text{ even, } n_{\max} = \frac{N}{2} \end{cases}$$

変形すると偶数と奇数の場合を合わせた表記を得る。

$$Z(\mathbf{J}^0) = e^{\beta C_2^N} \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\beta(N-n)n} \quad (4.6)$$

このように、エネルギー準位と縮退度を求めることで、強磁性体  $\mathbf{J}^0$  の分配関数を厳密に求めることができる。(4.6) の和の  $n$  は  $+1$  スピンの数、あるいは  $-1$  スピンの数であると解釈できるが、便宜上  $-1$  スピンの数と考えることにする。

#### 4.1.2 強磁性体の適応度

次に  $Z_f(\mathbf{J}^0)$  を求める。そのためには第  $n$  励起状態の配位のうち、ターゲット部分の揃った配位数  $W_f(E_n(\mathbf{J}))$  が分かればよい。 $-1$  をとるスピン数を  $n$  としたので、 $\mathbf{J}^0$  の第  $n$  励起状態には、 $-1$  を取るスピンの  $n$  個存在し、残りの  $N-n$  スピンが  $+1$  を取るスピン配位が対応している。 $n$  個の  $-1$  スピンと  $N-n$  個の  $+1$  スピンが存在するという条件下でターゲットを揃えるには、 $n$  個の  $-1$  スピンを全てターゲット以外の部分に入れるか、ターゲット部分を  $-1$  で揃え、残りの  $n-t$  個の  $-1$  スピンをターゲット以外の部分に入れるという二つの方法がある。したがって、 $W_f(E_n(\mathbf{J}))$  は二つの方法の和として、次のように与えられる。

$$W_f(E_n(\mathbf{J}^0)) = 2(C_n^{N-t} + C_{n-t}^N) \quad (4.7)$$

第一項は、ターゲット以外に  $n$  本  $-1$  スピンを入れる場合の数を表す。第二項は、ターゲットを全て  $-1$  にして、残りの  $n-t$  本の  $-1$  スピンをターゲット以外に入れる場合の数を表す。その  $Z_2$  対称な配位も適応配位であるので、係数  $2$  をかけた。ただし  $N-t < n$  である場合は第一項は  $0$  であり、 $n-t < 0$  である場合は第二項が  $0$  である。(4.7) を用いると、(4.1) の分子部分  $Z_f(\mathbf{J}^0)$  は

$$Z_f(\mathbf{J}^0) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} W_f(E_n(\mathbf{J}^0)) e^{-\beta E_n(\mathbf{J}^0)} = 2e^{\beta C_2^N} \sum_{n=0}^{N-t} C_n^{N-t} e^{-2\beta(N-n)n} \quad (4.8)$$

となる。(4.6) と合わせると、強磁性体  $\mathbf{J}^0$  の適応度は次の式で与えられる。

$$Fil(\mathbf{J}^0) = \frac{Z_f(\mathbf{J}^0)}{Z(\mathbf{J}^0)} = \frac{2 \sum_{n=0}^{N-t} C_n^{N-t} e^{-2\beta(N-n)n}}{\sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\beta(N-n)n}} \quad (4.9)$$

## 4.2 ゲージ変換と Mattis state $\mathbf{J}$ の適応度

$\mathbf{J}^0$  (強磁性体) 以外の Mattis state  $\mathbf{J}$  の配位とその適応度は、ゲージ変換の考えを用いて  $\mathbf{J}^0$  を変形することによって得られる。まずはゲージ変換について説明する。



## 4.2.1 ゲージ変換

ゲージ変換は、スピンと相互作用の、次のような変数変換である。

$$S_i \rightarrow S_i \sigma_i, \quad S_j \rightarrow S_j \sigma_j, \quad J_{ij} \rightarrow J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (4.10)$$

$\sigma_i$  は、各サイト  $i$  に与えられた変数であり、イジングスピン同様に  $\pm 1$  の二値をとる。ゲージ変換 (4.10) により、ハミルトニアンは

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \rightarrow - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \cdot S_i \sigma_i \cdot S_j \sigma_j = - \sum_{i < j} J_{ij} S_i S_j \quad (4.11)$$

となる。ハミルトニアンはゲージ変換により変化しない。このことを、ハミルトニアンはゲージ対称性を持ち、ゲージ不変であるという [10]。したがって、分配関数、自由エネルギーもゲージ不変である。

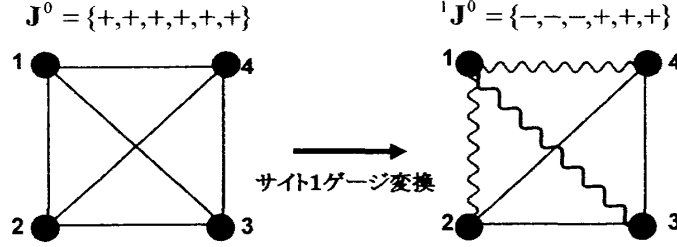
ここで、(4.10) で定義されるゲージ変換のうち、特に  $\sigma_i = -1$ ,  $\sigma_j = 1$  となる変換を「サイト  $i$  のゲージ変換」と呼ぶことにする。その物理的意味は次のように説明できる。ある相互作用配位  $\mathbf{J}$  の、 $k$  番目のサイトでゲージ変換を実行した相互作用配位を  ${}^k\mathbf{J}$  とすると、 ${}^k J_{ij} = J_{ij}$  ( $i, j \neq k$ ),  ${}^k J_{kj} = -J_{kj}$  である。 $\mathbf{J}$  において、配位  $\mathbf{S}$  が与えるエネルギーは、 ${}^k\mathbf{J}$  において配位  $\mathbf{S}'$  ( ${}^k S_i = S_i$ ,  ${}^k S_k = -S_k$ ) が与えるエネルギーと等しい。例として  $N = 4$  の場合の、サイト 1 のゲージ変換による  $\mathbf{J}$  の変化と、各エネルギー準位に対応する配位の変化を図 10 に示す。 $\mathbf{J} = \{J_{12}, J_{13}, J_{14}, J_{23}, J_{24}, J_{34}\}$  のサイト 1 をゲージ変換した配位  ${}^1\mathbf{J}$  は、サイト 1 にかかる相互作用が全て反転した配位であり、 ${}^1\mathbf{J} = \{-J_{12}, -J_{13}, -J_{14}, J_{23}, J_{24}, J_{34}\}$  となる。例えば  $\mathbf{J}^0$  のサイト 1 をゲージ変換した配位  ${}^1\mathbf{J}^0$  は  ${}^1\mathbf{J}^0 = \{-1, -1, -1, +1, +1, +1\}$  となる。 $\mathbf{J}^0$  の基底エネルギーはスピン  $\mathbf{S}$  が全て揃った配位により与えられるが、サイト 1 をゲージ変換した  ${}^1\mathbf{J}^0$  の基底エネルギーは、スピン  $S_1$  が反転した配位により与えられる。

このようにサイト  $i$  のゲージ変換により、異なる配位  ${}^i\mathbf{J}$  が得られる。もちろんこの変換によりエネルギー準位、縮退度とも不変であるので、 $Z(\mathbf{J}) = Z({}^i\mathbf{J})$  となり、新しい配位  ${}^i\mathbf{J}$  の分配関数も得られたことになる。

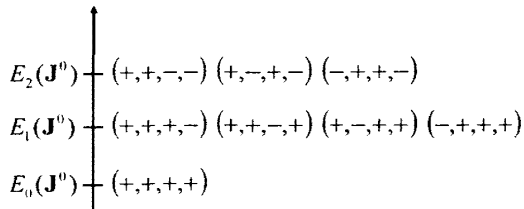
一方  $Z_f(E_n(\mathbf{J}))$  は、どのサイトをゲージ変換するかにより値が異なる。同じく  $N = 4$  で、 $S_1$  と  $S_2$  がターゲットの場合を例に説明する (図 11)。図 11(a) は、 $\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位と対応する配位であり、(b) は、 $\mathbf{J}^0$  のサイト 1 をゲージ変換した  ${}^1\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位と配位、(c) は、ターゲットではないサイト 3 をゲージ変換した  ${}^3\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位と対応する配位である。円で囲まれている配位が適応配位である。(b) のように、ターゲットであるサイト 1 をゲージ変換すると、各エネルギー準位での適応配位数  $W_f(E_n)$  は変化するため、適応度も変化する。一方 (c) のようにターゲット以外のサイトをゲージ変換しても  $W_f(E_n)$  は変化しないので、適応度は変化しない。このように  $Z_f(E_n(\mathbf{J}))$  はターゲット部のゲージ変換については変化するが、ターゲット以外のサイトのゲージ変換については不変である。また  $Z_2$  対称性より、ある一つのサイトをゲージ変換することと、残りの  $N - 1$  サイトをゲージ変換することは等しい。 $N = 4$  の場合で言うと、サイト 4 をゲージ変換することとサイト 1, 2, 3 を全てゲージ変換することは等しい。したがって「ターゲット以外のサイトのゲージ変換について不変である」とは、「全てのターゲットサイトをゲージ変換することについて不変である」と言い変えることもできる。

このように「サイト  $i$  のゲージ変換」の考え方をを用いることで、任意の  $\mathbf{J}$  から、新たに同じ分配関数を持つ  $\mathbf{J}$  配位を得ることができる。特にゲージ変換したサイトがターゲットサイトでなければ、その  $\mathbf{J}$  は同じ適応度を持つ。

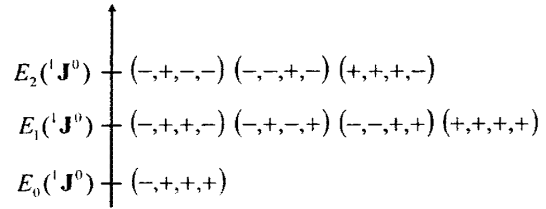
(a)



(b)

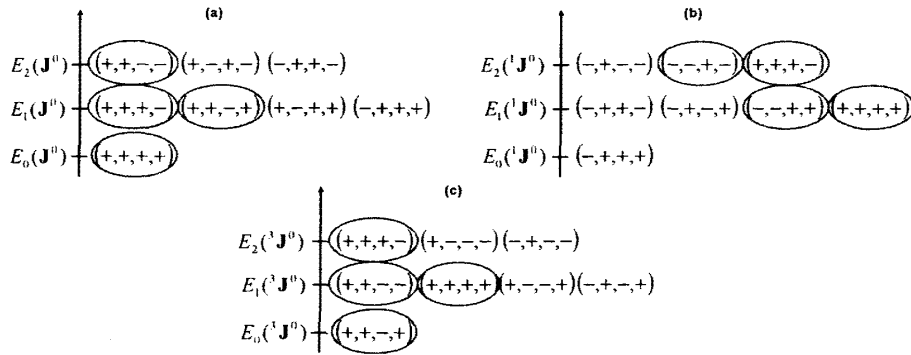


(c)


 図 10:  $N = 4$  の場合のエネルギー準位と対応するスピン配位.

 (a): サイト 1 のゲージ変換による  $\mathbf{J}$  配位の変化.  $\mathbf{J}^0$  は強磁性体を表し,  ${}^1\mathbf{J}^0$  は  $\mathbf{J}^0$  のサイト 1 をゲージ変換したもの.  $(+, +, +, +)$  は  $\mathbf{S} = \{S_1 = +1, S_2 = +1, S_3 = +1, S_4 = +1\}$  を意味する.

 (b):  $\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位.  $Z_2$  対称な配位は省略した.

 (c):  ${}^1\mathbf{J}^0$  のエネルギー順位.  $Z_2$  対称な配位は省略した. (b) と比較して, サイト 1 が反転している.

 図 11:  $N = 4$  の場合のエネルギー準位と対応するスピン配位.  $Z_2$  対称な配位は省略した.  $(+, +, +, +)$  は  $\mathbf{S} = \{S_1 = +1, S_2 = +1, S_3 = +1, S_4 = +1\}$  を意味する.  $\circ$  で囲んだ配位は,  $t = \{1, 2\}$  の場合の適応配位である.

 (a): 強磁性  $\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位.

 (b): サイト 1 をゲージ変換した  ${}^1\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位.

 (c): サイト 3 をゲージ変換した  ${}^3\mathbf{J}^0$  のエネルギー準位.

## 4.2.2 ゲージ変換による Mattis state の導出

$J^0$  をゲージ変換することにより,  $J^0$  以外の Mattis state, つまり  $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3 = 1$  を満たす  $J$  の配位を得たい. そのためには,  $\Phi_1 = 1$ , すなわちターゲット間相互作用は全て  $+1$  という特徴と,  $\Phi_2 = \Phi_3 = 1$ , すなわちターゲット以外の部分にフラストレーションが無いという二つの特徴を保存したままゲージ変換をしなくてはならない\*.

まず図 11.(b) から明らかなように,  $J^0$  のように  $\Phi_1 = 1$  である  $J$  の, ターゲット部分をゲージ変換して得られる  $J$  は  $\Phi_1 \neq 1$  であり, Mattis state ではない. つまり  $\Phi_1 = 1$  という性質を保存するためには,  $J^0$  のターゲット部分をゲージ変換してはならない. 一方,  $\Phi_2 = \Phi_3 = 1$  という性質の保存については特に考慮する必要が無い. というのは, フラストレーションはゲージ不変性を持つからである. フラストレーションのゲージ不変性を説明するため, 簡単に,  $i, j, k$  スピン間のフラストレーションを, 3 スピン間の相互作用が作るループの積  $J_{ij}J_{jk}J_{ki}$  で定義しておく. 通常のゲージ変換の定義 (4.10) に戻ってゲージ変換すると, ループ  $J_{ij}J_{jk}J_{ki}$  は

$$J_{ij}J_{jk}J_{ki} \rightarrow J_{ij}\sigma_i\sigma_j \cdot J_{jk}\sigma_j\sigma_k \cdot J_{ki}\sigma_k\sigma_i = J_{ij}J_{jk}J_{ki} \quad (4.12)$$

となり, ゲージ不変であることがわかる. もちろん「サイト  $i$  のゲージ変換 ( $\sigma_i = -1, \sigma_{j \neq i} = +1$ )」に対しても不変である.

したがって,  $J^0$  からゲージ変換で得られる  $J$  は全てフラストレーションを持たない. 逆に言えば, 全ての non-frustrated  $J$  は, ゲージ変換により  $J^0$  に変換される. その中でも  $\Phi_1 = 1$  が実現しているのは, ターゲットがゲージ変換されていない  $J$  であり, これらは全て  $J^0$  と同じ適応度を持つ. この  $J$  が, ここで定義した Mattis state に対応している. ゲージ変換で得られる  $J$  の個数は具体的に求めることができる. 一般に  $N$  個のスピンの存在する場合, ある  $J$  のゲージ変換により得られる  $J$  配位は, 自身も含めて

$$W_g(N) = \begin{cases} \frac{1}{48}(7N^3 - 6N^2 + 32N + 48) & \text{for } N \text{ even} \\ \frac{1}{48}(N+1)(7N^2 - 16N + 33) & \text{for } N \text{ odd} \end{cases} \quad (4.13)$$

である. よって Mattis state の個数は  $W_g(N-t)$  個である. またこれらの  $J$  の, 遺伝子型空間上での位置関係も把握することができる. 図 12 に  $N = 4$  の場合の具体例を示す.

$N = 4$  の場合,  $J^0$  をゲージ変換の中心にすると, 全部で 8 個の  $J^0$  が得られる. これらはすべて 0 フラストレーションである. 図 12 の赤い矢印はゲージ変換を意味し, 番号はゲージ変換するサイト番号を表している. 図 12 には一部の矢印のみ書き込んでいる. また円は, 置換に関して閉じていることを意味している.  $g$  回ゲージ変換した  $J$  と  $J^0$  のハミング距離  $r_g$  は次の漸化式を満たす.

$$r_g = r_{g-1} + (N-1) - 2(g-1), \quad r_0 = 0 \quad (4.14)$$

ただし  $g$  には上限がある. これを  $g_{max}$  とすると,

$$g_{max} = \begin{cases} \frac{N}{2} & \text{for } N \text{ even} \\ \frac{N-1}{2} & \text{for } N \text{ odd} \end{cases} \quad (4.15)$$

である. サイト 1 をゲージ変換した  $J$  と残りの  $N-1$  サイトをゲージ変換した  $J$  が等しいことから係数  $1/2$  がかかる. Mattis state は, 遺伝子型空間上で図 12 のように位置している. これらの Mattis state 近傍に存在する local Mattis state の適応度は 4.4 節で導出する.

\*ただし  $\Phi'_2 = \Phi'_3 = 0$  であり, 特定のパターンがめ込まれている必要はない.

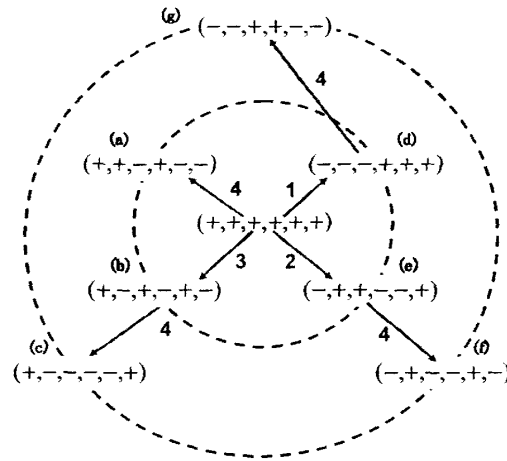


図 12: 強磁性体のゲージ変換で得られる、複数の Mattis state の、遺伝子型空間上での位置関係。例として  $N = 4$  の場合を示す。矢印はゲージ変換を意味し、番号はゲージ変換するサイトを表す。中央の強磁性体  $J^0$  と (a), (b), (c) が Mattis state である。

最後に、ターゲット部分のゲージ非対称性、ターゲット以外の部分のゲージ対称性について考察することで図 5\* に説明を与えてみる。ターゲット部のゲージ非対称性 (ターゲットをゲージ変換すると適応度が変化する) は、「ターゲットが揃ったら適応」という拘束条件によるものである。ターゲット部が全て  $+1$ 、または全て  $-1$  というパターンを局所的に埋め込むため、その部分だけゲージ不変性が崩れている。ターゲット部分の相互作用  $J_{tt}$  はゲージ対称性の破れにより  $+1$  しか許されず、その和 ( $\Phi_1$ ) は有限の値を持ち得る。一方、ターゲット以外の相互作用のゲージ変換に対して適応度は不変である。ターゲット以外には拘束条件が無いため、ゲージ変換の自由度が存在する。ゲージ変換の自由度が存在することでそのため、ある  $J$  が適応を獲得して存在している場合、その  $J$  のターゲット以外のサイト  $i$  をゲージ変換した  ${}^iJ$  も存在している。 $J$ 、 ${}^iJ$  のうち  $i$  の関わる相互作用の和は  $0$  である\*。同様のことが全てのターゲット以外のサイトで成り立つので、相互作用  $J_{to}$ ,  $J_{oo}$  の和 ( $\Phi'_2, \Phi'_3$ ) は  $0$  になる。一方、ゲージ変換ではフラストレーションは不変であり、 $J$  と  ${}^iJ$  の  $\Phi_2, \Phi_3$  は同じ値であることから、 $\Phi_2, \Phi_3$  は  $J$  と  ${}^iJ$  で打ち消し合わず、有限の値を取りうる。

### 4.3 ターゲットのゲージ変換に対する $J$ の適応度変化

前節では、適応度がターゲット以外のゲージ変換に対して不変であることを見た。では、 $J^0$  のターゲット部分をゲージ変換することにより、適応度はどのように変化するのか。 $J^0$  のターゲット部分をゲージ変換して得られた  $J$  とは、フラストレーションは無いが、 $\Phi_1 \neq 1$  という  $J$  である。このような  $J$  を  ${}^iJ^0$  と表記する。図 12 に示した  $N = 4, t = \{S_1, S_2\}$  の場合を例にとると、(d), (e), (f) がこの  ${}^iJ^0$  である。 $J^0$  を中心とするハミング距離  $r_g$  を半径とする円上には、Mattis state に加えて、このような  ${}^iJ^0$  も存在している。これらの適応度は  $J^0$  とは異なるが、 $J^0$  の適応度の表式を用いて記述できることを示す。ここでの議論は、ゲージ変換の中心が強磁性体でなくても一般的に成り立つ議論である。

図 11 に示した、エネルギー準位とスピン配位をもう一度見てみる。(b) が強磁性  $J^0$ 、中央が

\*あらゆる  $T_S$  で  $\Phi'_2, \Phi'_3 = 0$  であることを示している。

\* $\sum_j J_{ij} + \sum_j {}^iJ_{ij} = \sum_i (J_{ij} + {}^iJ_{ij}) = 0$

ターゲットサイト  $S_1$  をゲージ変換した  $\mathbf{J}$ , (c) がターゲットではないサイト  $S_3$  をゲージ変換した  $\mathbf{J}$  である. (b) の適応獲得配位 ( $S_1 = S_2$  である配位) は, 元の強磁性  $\mathbf{J}^0$  においては, 適応していない  $S_1 \neq S_2$  の配位に対応していることがわかる. 同様に一般の  $N$  と  $\mathbf{t}$  でも, ゲージ変換する前のエネルギー準位図において, ゲージ変換したターゲットが  $-1$  をとっている配位を数えて, エネルギーで重みづけて足し合わせれば適応度が求まる. 強磁性  $\mathbf{J}^0$  のターゲット  $t_1$  をゲージ変換した  ${}^1\mathbf{J}$  の適応度は

$$\begin{aligned} Fit(N, \mathbf{t}, {}^1\mathbf{J}^0) &= \frac{1}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \left[ \prod_{i \in \mathbf{t}} \delta(S_i - S_j) \right] e^{-\beta H(\mathbf{S} | {}^1\mathbf{J}^0)} \\ &= \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \left[ \prod_{i \in \mathbf{t}} \delta(S_i - 1) \right] e^{-\beta H(\mathbf{S} | {}^1\mathbf{J}^0)} \\ &= \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \delta(S_{t_1} + 1) \left[ \prod_{i \in \mathbf{t} \setminus t_1} \delta(S_i - 1) \right] e^{-\beta H(\mathbf{S} | \mathbf{J}^0)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

となる. 同様に  $t_1$  と  $t_2$  の二つのターゲットをゲージ変換した  ${}^{1,2}\mathbf{J}^0$  の適応度は

$$Fit(N, \mathbf{t}, {}^{1,2}\mathbf{J}^0) = \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \delta(S_{t_1} + 1) \delta(S_{t_2} + 1) \left[ \prod_{i \in \mathbf{t} \setminus \{t_1, t_2\}} \delta(S_i - 1) \right] e^{-\beta H(\mathbf{S} | \mathbf{J}^0)} \quad (4.17)$$

となる.  $\delta$  関数を挟むことにより, ターゲットサイトをゲージ変換した  ${}^1\mathbf{J}^0$  の適応度は, 元の  $\mathbf{J}^0$  の与えるハミルトニアンを用いて書き下すことができる. さらに,  $\mathbf{J}^0$  の適応度が

$$\begin{aligned} Fit(N, \mathbf{t}, \mathbf{J}^0) &= \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \left[ \prod_{i \in \mathbf{t}} \delta(S_i - 1) \right] e^{\beta H(\mathbf{S} | \mathbf{J}^0)} \\ &= \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \delta(S_{t_1} - 1) \left[ \prod_{i \in \mathbf{t} \setminus t_1} \delta(S_i - 1) \right] e^{\beta H(\mathbf{S} | \mathbf{J}^0)} \end{aligned} \quad (4.18)$$

と変形できることを用いて, (4.16) 式と合わせると

$$\begin{aligned} Fit(N, \mathbf{t}, \mathbf{J}^0) + Fit(N, \mathbf{t}, {}^1\mathbf{J}^0) &= \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \left[ \prod_{i \in \mathbf{t} \setminus t_1} \delta(S_i - 1) \right] e^{\beta H(\mathbf{S} | \mathbf{J}^0)} \\ &= Fit(N, \mathbf{t}', \mathbf{J}^0) \end{aligned} \quad (4.19)$$

となる. ここで  $\mathbf{t}'$  は,  $\mathbf{t}$  から  $t_1$  を除いたターゲットであり, 要素数は  $t-1$  である. したがって

$$Fit(N, \mathbf{t}, {}^1\mathbf{J}^0) = Fit(N, \mathbf{t}', \mathbf{J}^0) - Fit(N, \mathbf{t}, \mathbf{J}^0) \quad (4.20)$$

となり, ターゲット  $t_1$  をゲージ変換した  $\mathbf{J}$  の適応度が求められた. 特に  $\mathbf{J}^0$  のように一様な相互作用の場合は, 適応度はターゲットの選び方に依らないので (4.20) は

$$Fit(N, \mathbf{t}, {}^1\mathbf{J}^0) = Fit(N, t-1, \mathbf{J}^0) - Fit(N, \mathbf{t}, \mathbf{J}^0) \quad (4.21)$$

となる. 同様に, ターゲットを2つゲージ変換した  $\mathbf{J}$  の適応度 (4.17) も求めることができる. (4.16) を変形すると

$$Fit(N, \mathbf{t}, {}^{1,2}\mathbf{J}^0) = \frac{2}{Z^0} \text{Tr}_{\mathbf{S}} \delta(S_{t_1} + 1) \delta(S_{t_2} - 1) \left[ \prod_{i \in \mathbf{t} \setminus \{t_1, t_2\}} \delta(S_i - 1) \right] e^{-\beta H(\mathbf{S} | \mathbf{J}^0)}$$

となるので, (4.17) と合わせて

$$\begin{aligned} Fit(N, t, {}^t J^0) + Fit(N, t, {}^{t_1, t_2} J^0) &= \frac{1}{Z^0} \text{Tr} \delta(S_{t_1} + 1) \left[ \prod_{i \in t \setminus \{t_1, t_2\}} \delta(S_i - 1) \right] e^{-\beta H(\mathbf{S} | J^0)} \\ &= Fit(N, t'', {}^t J^0) \end{aligned} \quad (4.22)$$

を得る. ここで  $t''$  は,  $t$  から  $t_2$  を除いたターゲットである. したがって

$$\begin{aligned} Fit(N, t, {}^{t_1, t_2} J^0) &= Fit^0(N, t'', {}^t J^0) - Fit^0(N, t, {}^t J^0) \\ &= Fit(N, t''', J^0) - Fit(N, t'', J^0) - (Fit(N, t', J^0) - Fit(t, J^0)) \end{aligned} \quad (4.23)$$

となる.  $t'''$  は  $t$  から  $t_1, t_2$  を除いたターゲットである.  $J^0$  のように一様な相互作用の場合, (4.23) 式は

$$Fit(N, t, {}^{t_1, t_2} J^0) = Fit(N, t - 2, J^0) - 2Fit^0(N, t - 1, J^0) + Fit^0(N, t, J^0) \quad (4.24)$$

と書ける. 一般に

$$Fit(N, t, {}^{t_1, \dots, t_n} J^0) = Fit(N, t \setminus t_n, {}^{t_1, \dots, t_{n-1}} J^0) - Fit^0(N, t, {}^{t_1, \dots, t_{n-1}} J^0) \quad (4.25)$$

という漸化式が成り立つ. この式は, ターゲット数の増加に伴う相空間の分割に基づいていることがわかる. 図 13 に, ターゲット数  $l = 2, 3, 4$  の場合の相空間の構造を示す.  $t = 2$  の場合は, 相空間は  $S_1 = S_2$  と  $S_1 \neq S_2$  という二つの空間に分かれる. 適応度  $Fit(N, t = 2, \mathbf{J})$  は,  $S_1 = S_2$  の相空間に属す配位を数え上げ, エネルギーで重みづけて足し合わせることで求めることができる.  $t = 3$  の場合は,  $t = 2$  の相空間がさらに二つに分かれる. 同様に適応度  $Fit(N, t = 3, \mathbf{J})$  は  $S_1 = S_2 = S_3$  の相空間に属す配位を数え上げることで求めることができる. ターゲットサイト 3 をゲージ変換した  $\mathbf{J}$  の適応度は, 元の  $\mathbf{J}$  において  $S_3$  のみ反転している配位を数え上げることに対応していた. これは  $S_1 = S_2$  の相空間から  $S_1 = S_2 = S_3$  の相空間を引いた部分である.

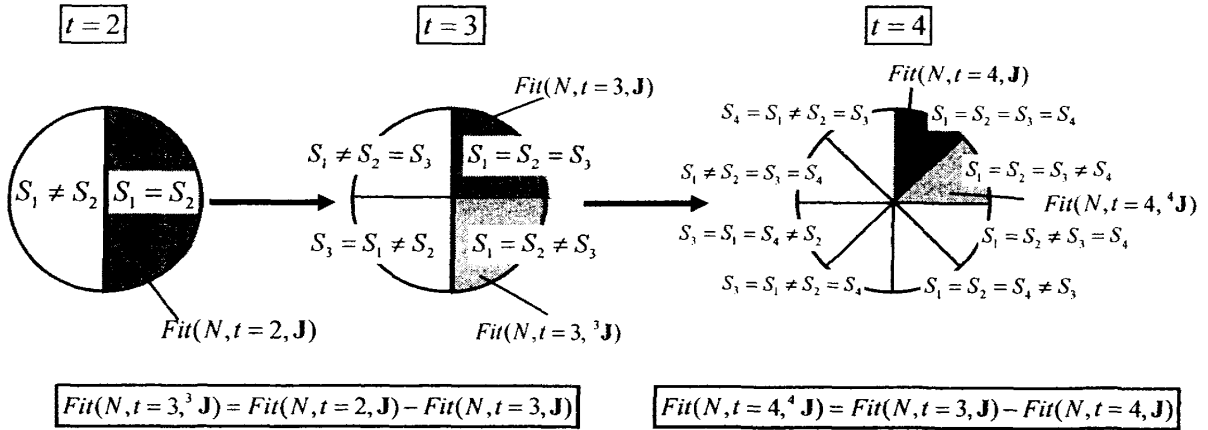


図 13: ターゲット数が  $l = 2$  から  $l = 4$  の場合の相空間. ターゲットが一つ増えると, 相空間が分割される. ターゲット部をゲージ変換した  $\mathbf{J}$  の適応度は, 元の  $\mathbf{J}$  で適応してない配位を拾ってくることに対応するので, 相空間の構造を考慮することで理解できる.

ここまでの計算により, Mattis state ( $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi_3$ ) の適応度 (4.9) と,  ${}^t J^0$  ( $\Phi_1 \neq 1, \Phi_2 = \Phi_3 = 1$ ) の適応度 (4.25) が求まった. 次の節では, Mattis state の近傍に存在する local Mattis state の適応度について考える.

#### 4.4 local Mattis state の適応度

前節で得た Mattis state は、中間温度  $T_S(T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2})$ 、特に  $T_S \sim 2.0$  で進化させることにより、特異的に選択される。その近傍にある local Mattis state の適応度を導出したい。Mattis state を除く local Mattis state とは  $\Phi_1 = \Phi_2 = 1$  であるが  $\Phi_3 \neq 1$ 、つまりターゲット以外のスピン間相互作用 ( $J_{oo}$ ) に有限のフラストレーションが存在している状態であった。そこで、まず全ての Mattis state のゲージ変換の中心である  $J^0$  に、摂動的に反強磁性相互作用を加え、その適応度を書き下す。その際  $\Phi_1 = 1, \Phi_2 = 1, \Phi_3 \neq 1$  という local Mattis state の性質を保存するため、ターゲット以外のスピン間の相互作用に反強磁性相互作用を加える。また、反強磁性相互作用の数とフラストレーションの数 ( $J_{ij}J_{jk}J_{kl} = -1$  となるループの数) を等しくさせるように、反強磁性相互作用同士がサイトを共有しないように入れる。このように  $n_a^o$  本の反強磁性相互作用を持ち、 $n_a^o$  個のフラストレーションをもつ local Mattis state を  $J^{n_a^o}$  と定義する。上付きの  $o$  は、ターゲット以外の相互作用に  $n_a$  本の反強磁性相互作用が入っていることを示している。またサイトを共有しないという制限から、 $n_a^o$  には上限  $n_{amax}^o$  が存在する。

$$n_{amax}^o = \begin{cases} (N-t-1)/2 & \text{for } N-t \text{ odd} \\ (N-t)/2 & \text{for } N-t \text{ even} \end{cases} \quad (4.26)$$

$J^{n_a^o}$  の適応度の導出の出発点は、強磁性体  $J^0$  である。 $C_2^N$  本の ferro ボンドのうち  $n_a$  本を anti-ferro ボンドに変えることで、エネルギー準位と縮退度がどのように変化するかを追い、分配関数と適応度を求める。

まず  $J^{n_a^o}$  の分配関数を求めるには、エネルギー  $E_n(J^{n_a^o})$  と縮退度  $W(E_n(J^{n_a^o}))$  が求まればよい。図 14 に、 $J^0$  と  $J^{n_a^o}$  のエネルギー準位と縮退度を示す。ハミルトニアン係数  $1/\sqrt{N}$  は省略する。ここで、エネルギーの低い反強磁性ボンド (両端のスピンが反転している) を happy bond、エネルギーの高い反強磁性ボンド (両端のスピンが揃っている) を unhappy bond と呼ぶ。反強磁性ボンドの増加により happy bond が生まれた場合、エネルギーは 2 減少し、unhappy bond が生まれた場合、エネルギーは 2 増える。図 14 に示すように、 $n_a^o$  本の反強磁性が加わった場合、 $J^0$  の基底の配位 ( $\{S_i\} = \{+, +, \dots, +\}$ ) については、 $n_a$  本の反強磁性ボンドが全て unhappy bond になるので、エネルギーが  $2n_a^o$  上昇する。状態数は  $W(E_n(J^0)) = W(E_n(J^{n_a^o})) = 1 \times 2$  のままである。 $J^0$  の第一励起状態の配位は、一つのスピンだけ  $-1$ 、残りは  $+1$  をとる配位とその  $Z_2$  対称な配位であった\*。その 1 つの  $-1$  スピンが、新たに加えられた反強磁性ボンド上に存在していれば、 $n_a^o$  本の反強磁性ボンドのうち 1 本は happy bond になる。 $-1$  スピンが反強磁性ボンド上に存在していなければ、 $n_a^o$  本の反強磁性ボンドはすべて unhappy bond である。よって、 $n_a^o$  個の反強磁性ボンド全てが unhappy bond であるスピン配位と、そのうちの 1 つの反強磁性ボンドが happy bond であるスピン配位へと、縮退が 2 つにほどける。前者のエネルギーは  $E_1(J^0) + 2n_a^o$ 、後者は  $E_1(J^0) + 2(n_a^o - 1)$  となる。また縮退度は合計で  $W(E_1(J^0))$  になるので、片方の縮退度だけ求めればよい。そこで  $n_a$  本の反強磁性ボンドのうち 1 本が happy bond となる場合の数を求める。 $n_a$  本の反強磁性ボンドから 1 本の happy bond を選ぶ方法は  $C_{1-1}^{n_a}$  通りである。happy bond 部に 1 つの  $-1$  スピンが与えられている。第一励起状態は、1 つの  $-1$  スピンを持っていた。したがって、反強磁性ボンドに寄与してない残りの  $N - 2n_a^o$  スピンに割り当てべき  $-1$  スピンは 0 本であるので、その場合の数は  $C_{1-1}^{N-2n_a^o} = 1$  である。happy bond の両端のスピンを  $S_i, S_j$  とすると、( $S_i = +1, S_j = -1$ ) と ( $S_i = -1, S_j = +1$ ) の 2 通りの配位が考えられるので場合の数は  $\times 2^1$  となる。よってエネルギー  $E_1(J^0) + 2(n_a^o - 1)$  を持つ、happy

\*励起数  $n$  は  $-1$  スピンの数である。(  $+1$  でも構わないが便宜上  $-1$  としている。 )

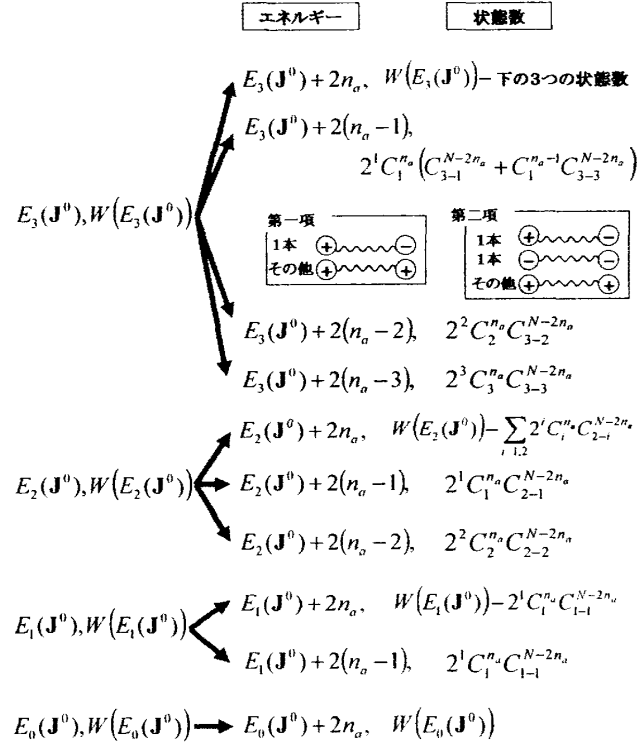


図 14: 強磁性体  $J^0$  に  $n_a$  本の anti-ferro ボンドを, サイトを共有しないように入れた場合のエネルギー準位と縮退度の変化.

bond が 1 本存在する配位数は  $2^1 C_1^{n_a} C_{1-1}^{N-2n_a}$  である.  $J^0$  の第二励起状態も同様である. ただし反強磁性 happy bond 数が最大で 2 になるので, 0 本の場合, 1 本の場合, 2 本の場合の 3 つに縮退がほどける. 第三励起状態以上では注意が必要である. happy bond が  $n_+$  本存在する場合, 残りの  $-1$  スピンは  $n - n_+$  本である.  $n - n_+$  が 2 以上である場合,  $(S_i = -1, S_j = -1)$  で損をする反強磁性体出現する. 例えば第三励起状態では, happy bond が 1 本存在する場合, 残りの  $-1$  スピンは 2 つであり,  $(S_i = -1, S_j = -1)$  で損をする反強磁性体出現可能である. この場合, 3 つの  $-1$  スピンを全て反強磁性ボンドに寄与するスピンの使っているため, 残りの ferro ボンドに寄与するスピンの割り当てられる  $-1$  スピンは 0 である. このように, 反強磁性ボンドに寄与していない残りの  $N - 2n_a$  スピンに割り当てるべき  $-1$  スピンの数が変わる. 図に表すと図 14 のようになる. 以上をまとめると, 分配関数は

$$\begin{aligned}
 Z(J^{n_a}) = & \exp(-2\beta)n_a \left[ Z(J^0) \right. \\
 & \left. + 2 \sum_{n=1}^{n_{max}} e^{-\beta E_n(J^0)} \sum_{n_+=1}^{\min(n, n_a)} C_{n_+}^{n_a} 2^{n_+} \left( e^{4\beta n_+} - 1 \right) \sum_{x=0}^{n_a - n_+} C_x^{n_a - n_+} C_{n - (n_+ + 2x)}^{N - 2n_a} \right] \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

と求められる.  $n_a$  は反強磁性ボンドの本数,  $n_+$  は反強磁性 happy bond の数,  $x$  は反強磁性 unhappy bond のうち両端のスピンの  $-1$  をとるボンド数である.  $n_{max}$  は (4.4), (4.5) で与えられた, 励起状態の上限である. さらに展開してまとめると

$$Z(J^{n_a}) = \exp(-2\beta n_a) \left[ Z(J^0) + \sum_{n=1}^{n_a} 2^n C_n^{n_a} \left( 2e^{2\beta} \sinh(2\beta) \right)^n \sum_{i=n}^{N-n} e^{-\beta E_i(J^0)} C_{i-n}^{N-2n} \right] \quad (4.28)$$



となる。(4.28)は、 $Z(\mathbf{J}^{n_a^0})$ は $Z(\mathbf{J}^0) \sim Z(\mathbf{J}^{n_a^0-1})$ の多項式であることを意味している。このように、強磁性 $\mathbf{J}^0$ の与えるハミルトニアンを用いて $\mathbf{J}^{n_a^0}$ の分配関数を得ることができる。ここまで、「ターゲット以外の相互作用に $n_a^0$ 本の反強磁性ボンドが存在する $\mathbf{J}$ の分配関数」を考えてきたが、分配関数は反強磁性ボンドの入っている位置に依らないことを注記しておく。この $n_a^0$ 本のボンドがターゲット間に入っているとしても、その本数が等しければ分配関数は等しい。そこで以下、この分配関数を $Z(\mathbf{J}^{n_a})$ と統一して表記する。

次に $Z_f(\mathbf{J}^{n_a})$ を求める。こちらは分配関数と異なり、反強磁性ボンドの位置に依存する。 $Z_f(\mathbf{J}^{n_a})$ を求める手法は、分配関数 $Z(\mathbf{J}^{n_a})$ を求めたものと同様で、強磁性体のエネルギーと適応配位数が反強磁性ボンドの増加によりどのように変化するかを追って $Z_f(\mathbf{J}^{n_a})$ を書き下す。結果、

$$Z_f(\mathbf{J}^{n_a^0}|N, t, T) = e^{-2\beta n_a^0} Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T) + 2e^{-2\beta n_a^0} \sum_{n=1}^{n_a^0} 2^n C_n^{n_a^0} (2e^{2\beta} \sinh(2\beta))^{n_a^0} \sum_{i=n}^{N'-n} C_{n-i}^{N'-2n} e^{-\beta E_i(\mathbf{J}^0)} \quad (4.29)$$

が求まり、 $Fit(\mathbf{J}^{n_a^0}) = Z_f(\mathbf{J}^{n_a^0})/Z(\mathbf{J}^{n_a})$ となる。ここで $N' = N - t$ とした。

また、ここでは立ち入らないが、(4.28), (4.29)の $N \rightarrow \infty$ における近似形の導出を、Appendixにおいて示す。

#### 4.5 ターゲットに反強磁性相互作用が入った $\mathbf{J}$ の適応度

一方、ターゲットに $n_a^t$ 本の反強磁性ボンドの入った $\mathbf{J}^{n_a^t}$ の適応度も求めることができる。この $\mathbf{J}$ は $\Phi_1, \Phi_2 \neq 1$ であり、local Mattis stateではない。このような $\mathbf{J}^{n_a^t}$ を、target frustrated stateと呼ぶことにする。 $\mathbf{J}^{n_a^t}$ の適応度は以下のように求められる。

$$Fit(\mathbf{J}^{n_a^t}|N, t, T) = \frac{1}{Z(\mathbf{J}^{n_a})} Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T) e^{-2\beta n_a^t} \quad (4.30)$$

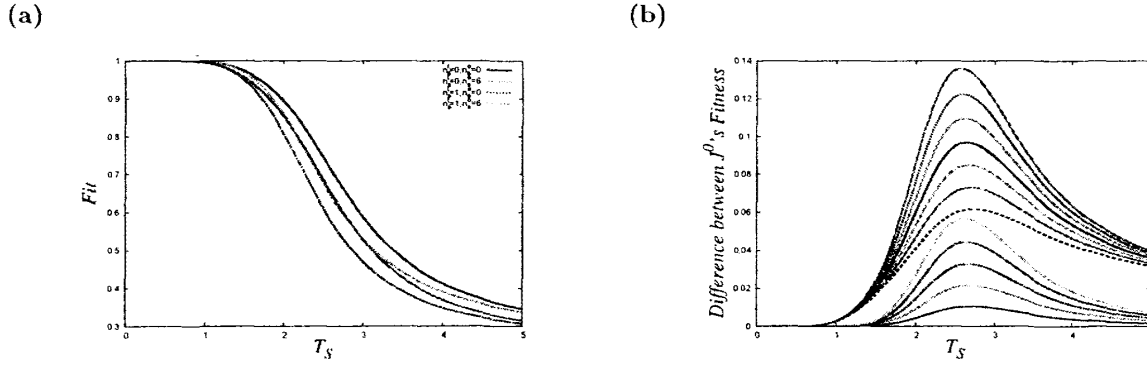
これはlocal Mattis stateの適応度(4.29)の第一項目に相当する。ターゲット間相互作用が反強磁性ボンドで置き換わるたびに、適応配位は必ずエネルギーを2ずつ上げる。上の表式の $e^{-2\beta n_a^t}$ はその効果を表している。この考え方を応用させると、ターゲット間に $n_a^t$ 本、その他のスピンの間に $n_a^0$ 本の反強磁性ボンドの入った $\mathbf{J}^{n_a^t+n_a^0}$ の適応度を求めることもでき、以下ようになる。

$$Fit(\mathbf{J}^{n_a^t+n_a^0}) = \frac{Z_f(\mathbf{J}^{n_a^0})}{Z(\mathbf{J}^{n_a^t+n_a^0})} e^{-2\beta n_a^t} \quad (4.31)$$

#### 4.6 結果

前節までで求めたlocal Mattis state(Mattis stateを含む)、target frustrated stateの適応度の表式を用いて、 $N = 15, t = 3$ の場合を考えてみる。 $N = 15, t = 3$ では、サイトを共有しないように、最大7本の反強磁性ボンドを入れることができ、 $n_a^t = 0, 1, n_a^0 = 0, 1, \dots, 6$ が許されている。このうちlocal Mattis stateは $n_a^t = 0$ の配位であり、target frustrated stateは $n_a^t = 1$ の配位である。図15.(a)に、 $\mathbf{J}^0$ と、13通りの $\mathbf{J}$ を代表して $(n_a^t, n_a^0) = (0, 6), (1, 0), (1, 6)$ の適応度を示す。図15.(b)は、 $\mathbf{J}$ と強磁性体 $\mathbf{J}^0$ の適応度差の $T_S$ 依存性をプロットしたものである。上から $(n_a^t, n_a^0) = (1, 6) \sim (1, 0), (0, 6) \sim (0, 1)$ である。これら13通りの $\mathbf{J}$ と強磁性体 $\mathbf{J}^0$ は $T_S$ 低温では縮退しているが、 $T_S$ を上げていくと縮退がほどけることがわかる。

$T_S$ 低温での適応度の縮退は次のように解釈することができる。適応度を各エネルギー準位の縮退度 $W(E_n(\mathbf{J}))$ と適応配位数 $W_f(E_n(\mathbf{J}))$ で表した(4.1)の $T_S \rightarrow 0$  ( $\beta_S \rightarrow \infty$ )極限を取る


 図 15: 様々な  $J$  の適応度の  $T_S$  依存性.

(a): Mattis state( $n_a^t, n_a^o$ ) = (0, 0), local Mattis state(0, 6), target frustrated state(1, 0), (1, 6) の適応度.

(b): Mattis state とその他の  $J$  との適応度差の  $T_S$  依存性. 上の 6 本は target frustrated state ( $n_a^t, n_a^o$ ) = (1, 6) ~ (1, 0), 下の 6 本は local Mattis state (0, 6) ~ (0, 1) である.

と,  $Fil(J|T_S, T_I) \rightarrow W_f(E_0(J))/W(E_0(J))$  となり,  $W_f(E_0(J)) = W(E_0(J))$  を満たす  $J$  が適応度 1 を獲得していることがわかる. local Mattis state(ただし  $N > 4^*$ ) だけでなく, target frustrated state のように, フラストレーションを持つ  $J$  もこの条件を満たすので, 適応度 1 を獲得し, local Mattis state と縮退している.

このように,  $T_S$  低温では local Mattis state も適応しているはずであるが, 数値計算で観測した物理量には local Mattis state の影響は反映されていなかった. これは, 縮退を考慮に入れることで理解できる.  $T_S$  低温では, local Mattis state とその他のフラストレーションのある  $J$  が全て縮退しており, 後者の状態数の方が圧倒的に多いため, local Mattis state の性質は殆ど反映されない. したがって,  $T_S$  低温では全体として見るとフラストレーションが大きいという数値計算の結果が得られたことがわかる.

一方  $T_S$  中間温度では  $J$  の縮退がほどけ, Mattis state の適応度が最も大きく, わずかな差で local Mattis state の適応度が続く. target frustrated state は, local Mattis state よりも温度上昇に対して適応度を下げていることがわかる. この温度領域では local Mattis state と target frustrated state の間に適応度差が生まれている.

ここで,  $T_S$  低温において  $W(E_0(J)) = W_f(E_0(J))$  を満たす  $J$  が作る, 適応度地形上の適応度 1 の平面を neutral space と呼ぶことにする. また neutral space 上の  $J$  は, 全て 1 point mutation を通して繋がっているとする. neutral space には local Mattis state, さらに target frustrated state も含まれる.  $J^0 \rightarrow J^1 \rightarrow J^2 \dots$  と 1 point mutation を通して繋がることから, これらが作る適応度 1 の平面を sub neutral space と呼ぶことにする. ターゲット以外の部分のゲージ変換により得られる  $J$  は, もとの  $J$  と同じ適応度を持つ. その場合の数は  $W_g(N-t)$  であったので, 適応度空間上には, この sub neutral space が  $W_g(N-t)$  個存在する. これら  $W_g(N-t)$  個の sub neutral space の間は, どのような  $J$  で繋がっているか. またその適応度地形を得ることはできるか.

#### 4.7 sub neutral space をつなぐ $J$ の適応度

sub neutral space 間を 1 point mutation でつなぎ, かつ適応度が 1 である経路が存在すれば, local Mattis state と target frustrated state が作る  $W_g(N-t)$  個の sub neutral space は全てつな

\*  $N = 4$  の場合,  $n_{a \max}$  まで反強磁性バンドを入れると基底状態に縮退が生じる. 場合によっては適応条件を満たさない.

がり, 大きな neutral space を形成している, と言うことができる. 一方, そのような経路が存在していないのであれば, neutral space は複数存在し, 少なくとも  $W_g(N-t)$  個以上存在している, と言うことができる. そこで  $W_g(N-t)$  個の sub neutral space 間に, 1 point mutation を通して繋がる経路が存在するかどうか確かめてみる.

$J^0$  のあるサイト  $i$ , ( $i \notin t$ ) をゲージ変換すると, サイト  $i$  が関与する全ての相互作用は反強磁性ボンドになる. 相互作用は全結合なので, 一つのサイトは  $N-1$  個のスピンの相互作用している. ここで, あるサイト  $i$  に  $n_a$  本の反強磁性相互作用が存在している配位を  $\tilde{J}_i^{n_a}$  と定義すると,  $J^0$  のサイト  $i$  をゲージ変換した  ${}^iJ^0$  は,  $\tilde{J}_i^{N-1}$  でもある.  $J^0 = \tilde{J}_i^0$  と  ${}^iJ^0 = \tilde{J}_i^{N-1}$  のハミング距離は  $N-1$  である.  $J^0$  と  ${}^iJ^0$  間の  $N-1$  の距離は,  $J^1 = \tilde{J}_i^1 \rightarrow \tilde{J}_i^2 \rightarrow \dots \tilde{J}_i^{N-1}$  によってつながれる. この  $\tilde{J}_i^{n_a}$  によってつくられる経路を  $P_i$  とする. 経路  $P$  も  $T_S$  低温で適応度 1 を獲得しているのであれば, local Mattis state  $J^{n_a}$  と target frustrated state  $J^{n_t}$  が作る sub neutral space  $NS$  と,  ${}^iJ^{n_a}$  と  ${}^iJ^{n_t}$  が作る sub neutral space  ${}^iNS$  は, 経路  $P_i$  を通して繋がり, 大きな neutral space を形成している. 実際, これらの  $\tilde{J}^{n_a}$  は条件  $W(E_0(J)) = W_f(E_0(J)) = 1$  を満たしていることは簡単な考察からわかる\*. よって  $T_S$  低温では sub neutral space  $NS$  と  ${}^iNS$  は経路  $P_i$  によって繋がり,  $NS \rightarrow P \rightarrow {}^iNS$  という neutral space を形成していることがわかる. さらに残りの sub neutral space も経路  $P$  をゲージ変換した経路を介して全て繋がっている. すなわち  $NS \rightarrow P \rightarrow {}^iNS \rightarrow {}^jP \rightarrow {}^{ij}NS \rightarrow \dots$  と,  $W_g(N-t)$  個の sub neutral space は  $\tilde{J}^{n_a}$  が作る sub neutral space  $P$  を介して全てつながり, 大きな neutral space を形成している.

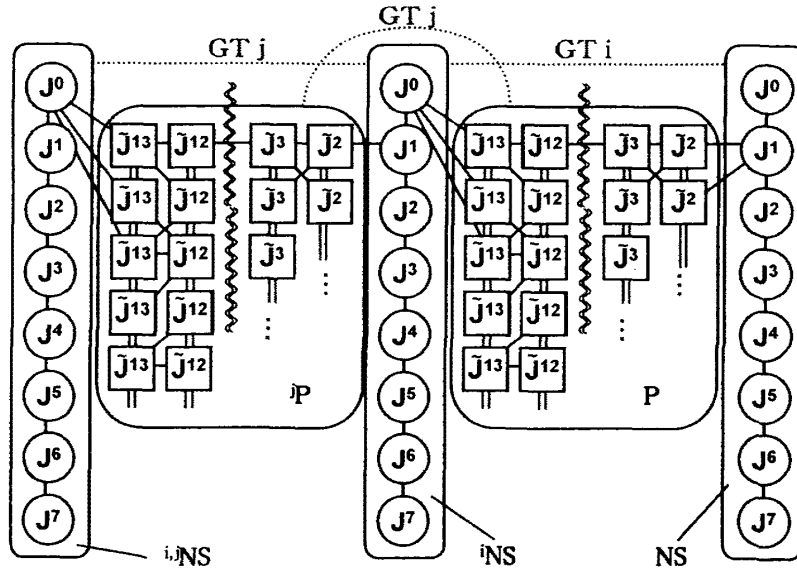


図 16:  $T_S$  低温で形成される適応度地形上の neutral space. 実線でつながった  $J$  は 1 point mutation で移れる  $J$  を表す. 点線はゲージ変換で移れる  $J$  を表す.  $GT_i$  とは, サイト  $i$  ( $i \in t$ ) のゲージ変換で移れることを示している. 二重線は置換で移れる  $J$  を表す. 実際の進化ダイナミクスは黒線を経由して進む. Mattis state と local Mattis state が作る sub neutral space を  $NS$  とする. またこれらをそれぞれサイト  $i$  に関してゲージ変換した  ${}^iJ^0$ ,  ${}^iJ^{n_a}$  が作る sub neutral space を  ${}^iNS$  としておく.  $NS$  と  ${}^iNS$  は  $\tilde{J}^{n_a}$  が作る sub neutral space  $P_i$  を介して繋がっている. さらに  ${}^iNS$  と  ${}^{ij}NS$  は  ${}^jP_i$  を介して繋がる. 結局  $W_g(N-t)$  個の sub neutral space は 1 point mutation を通して繋がっていることがわかる. また繋がり方はこの限りではなく, さらに他の neutral space が存在している可能性もある.

\*まず  $n_a \leq N/2$  であるかぎり, 基底状態に縮退は生じず, 強磁性体の基底がそのまま保存され,  $T_S$  低温においては適応できる. 更にサイト  $i$  をゲージ変換することで  $n_a > N/2$  が得られるが, ターゲット以外のゲージ変換に対して適応度は不変であるので,  $n_a \leq N/2$  と同様に適応できる.

図 16 に, sub neutral space が経路  $P$  により繋がっている様子を示した.  $T_S$  低温では適応  $J$  同士が 1 point mutation で繋がり, 適応度地形上に大きな neutral space を形成されていることがわかった.  $T_S$  低温での進化ダイナミクスは, neutral space を見つけた後は, このような大きな neutral space 上でのランダムウォークとなると考えられる.

ここまで, sub neutral space とそのサイト  $i$  ( $i \notin t$ ) についてゲージ変換された sub neutral space をつなぐ経路  $\tilde{J}_i^{n_a}$  について考察してきたが,  $i \in t$  の場合はどうなるだろうか.  $T_S$  低温の場合の適応条件  $W(E_0(J)) = W_f(E_0(J))$  に戻ってみると, この条件は, 適応度が  $T_S$  低温において  $Fit(J) = W_f(E_0(J))/W(E_0(J))$  と記述できることから導出されたものであった. つまり「 $T_S$  低温における非適応条件」,  $W_f(E_0(J)) = 0$  も導くことができる. この非適応条件を満たすのは,  $W_f(E_0(J)) = 1 \times 2$  を満たす  $J$  配位のターゲット部分をゲージ変換した  $J$  である\*. したがって local Mattis state 及び target frustrated state をゲージ変換した  ${}^tJ^{n_a}$ ,  ${}^tJ^{n_a}$  は  $T_S$  低温における非適応  $J$  である. 先ほどの考察から,  $J^{n_a}$ ,  $J^{n_a}$  がつくる sub neutral space と,  ${}^tJ^{n_a}$ ,  ${}^tJ^{n_a}$  がつくる sub neutral space は  $\tilde{J}_i^{n_a}$  により繋がっていることがわかる. 前者は適応した  $J$  であり, 後者は適応していない  $J$  である. すなわち  $\tilde{J}_i^{n_a}$  の作る経路は適応  $J$  と非適応  $J$  の境界に対応している. また  $\tilde{J}_i^{n_a}$  は  $\Phi_2 \neq 1$  である.

そこでこの境界の地形を得るため,  $\tilde{J}_i^{n_a}$  の,  $i \in t$  または  $i \notin t$  の適応度を求める. まず分配関数は, 反強磁性ボンドの位置に依存しないので,  $i$  がターゲットの場合でもターゲット以外の場合でも共通である. 求め方は  $J^{n_a}$  と同様に,  $J^0$  に反強磁性ボンドを加え, エネルギー準位と縮退度の変化を追う. 結果, 次の表式を得る.

$$Z(\tilde{J}^{n_a}) = 2 \sum_{n=0}^{n_{max}} e^{-\beta E_n(J^0)} \left( \sum_{x=0}^{\min(n, n_a)} C_x^{n_a} C_{n-x}^{N-1-n_a} e^{2\beta(2x-n_a)} + \sum_{y=0}^{\min(n-1, n_a)} C_y^{n_a} C_{n-1-y}^{N-1-n_a} e^{-2\beta(2y-n_a)} \right) \quad (4.32)$$

第一項は  $S_i = +1$ , 第二項は  $S_i = -1$  の場合を表している.  $S_i = +1$  であった場合, 残りのサイトに  $n$  個の  $-1$  スピンを入れなくてはならない.  $i$  と反強磁性ボンドで繋がるスピンの  $-1$  を取ってればエネルギーは下がり, そうでなければエネルギーは上がる. 和の  $x$  は,  $i$  と反強磁性ボンドでつながるスピンのうち,  $-1$  を取るスピンの数を表している. また  $S_i = -1$  であった場合,  $i$  に反強磁性ボンドが入るたびにエネルギーは下がる. ただし, 反強磁性ボンドでつながるスピンの  $-1$  スピンを取る場合は, エネルギーはあがる. 和の  $y$  も,  $i$  と反強磁性ボンドでつながるスピンのうち,  $-1$  を取るスピンの数を表している.

次に  $Z_f(\tilde{J}_i^{n_a})$  を求める.  $Z_f(\tilde{J}_i^{n_a})$  は,  $i$  がターゲットであるのかその他のスピンであるのかによって値が異なる.  $i$  がターゲット以外のスピン  $o$  ( $o \notin t$ ) であるときは,

$$Z_f(\tilde{J}_o^{n_a}) = 2 \sum_{n=0}^{n_{max}} e^{-\beta E_n(J^0)} \left[ \sum_{x=0}^{\min(n, n_a)} C_x^{n_a} \left( C_{n-x}^{N-1-n_a-t} + C_t^t C_{n-x-t}^{N-1-n_a-t} \right) e^{-2\beta(-2x+n_a)} \right. \\ \left. + \sum_{y=0}^{\min(n-1, n_a)} C_y^{n_a} \left( C_{n-1-y}^{N-1-n_a-t} + C_t^t C_{n-1-y-t}^{N-1-n_a-t} \right) e^{-2\beta(2y-n_a)} \right] \quad (4.33)$$

\*図 11 に示したように, ターゲットをゲージ変換することで, 基底状態の適応配位は非適応配位になるためである.

となる．一方  $i \in t$  である場合は

$$Z_f(\tilde{J}_t^{n_a}) = 2 \sum_{n=0}^{n_{\max}} e^{-\beta E_n(J^0)} \left[ \sum_{x=0}^n C_x^{n_a} \left( C_{n-x}^{N-1-n_a-t} + C_t^t C_{n-x-t}^{N-1-n_a-t} \right) e^{-2\beta(-2x+n_a)} \right. \\ \left. + \sum_{y=0}^{\min(n-1, n_a)} C_y^{n_a} \left( C_{t-1}^{t-1} C_{n-1-y-(t-1)}^{N-1-n_a-(t-1)} \right) e^{-2\beta(2y-n_a)} \right] \quad (4.34)$$

となる．

$n_a$  について触れておくと， $\tilde{J}_i^{n_a}$ ,  $n_a \leq N/2$  を  $i$  についてゲージ変換すると  $\tilde{J}_i^{N-n_a}$  となるため， $n_a \leq N/2$  の適応度が分かれば，あとは 4.3 節の方法に従って自動的に  $n_a \geq N/2$  の適応度が求められる．次節ではこれらの結果を合わせて，適応度地形の構造を理解する．

#### 4.8 適応度地形の温度依存性と変異に対するロバストネス

local Mattis state とそのターゲットをゲージ変換した  $J$  をつなぐ経路 ( $\tilde{J}_t^{n_a}$ ,  $n_a = 1, \dots, N-1$ ) の温度依存性を図 17(a) に示す．横軸に  $n_a$  を取り，縦軸に  $\tilde{J}_t^{n_a}$  の適応度を示す． $n_a = 0$  が強磁性体  $J^0$  で， $n_a = N-1$  が  ${}^tJ^0$  である． $T_S$  低温の場合は， $n_a = 6$  までは適応度 1 で，1 フリップして  $n_a = 7$  になると急激に適応度が下がる\*． $n_a = 8$  では完全に適応度は 0 である．一方  $T_S = 2.0$  の中間温度では，経路  $P_t$  の適応度は緩やかに推移する．

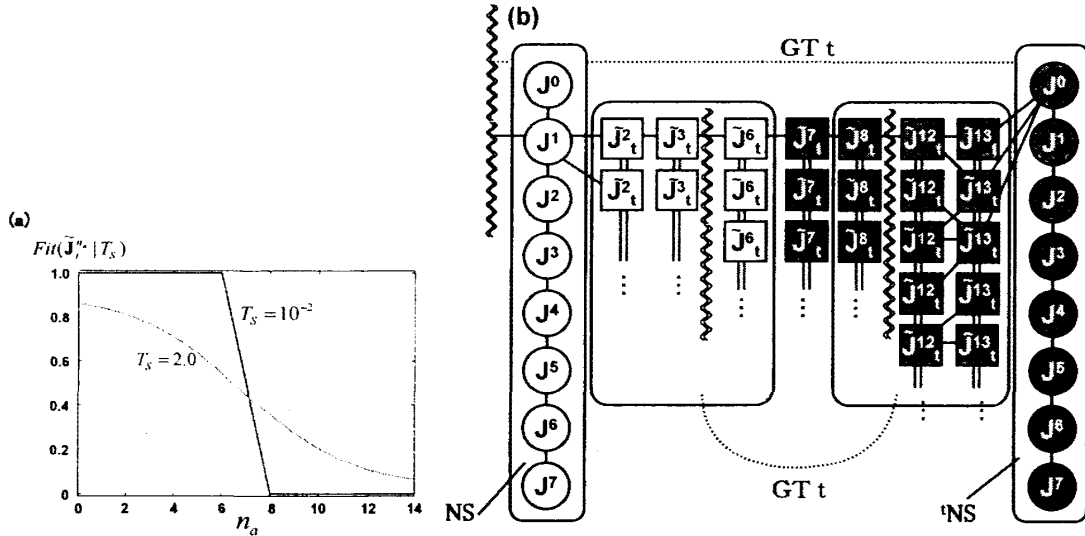


図 17: 強磁性体  $J^0$  (a): 適応度ピークと谷の境界の温度依存性.  $J^0$  と  ${}^tJ^0$  の間をつなぐ経路  $P_t (= \tilde{J}_t^{n_a})$  の適応度を，横軸を  $n_a$  としてプロットした．赤線が  $T_S$  低温，緑線が  $T_S$  中間温度．

(b): 経路  $P_t$  の結果を受けて， $T_S$  低温で形成される neutral space  $NS$  とそのゲージ変換で得られる非適応 neutral space  ${}^tNS$  の構造を模式的に示した． $NS$  の左側は図 16 とつながり，各線の意味は図 16 と同じである． $GTt$  とは，ターゲットサイトのゲージ変換で移れることを示している．経路  $P_t$  には  $n_a = (N-1)/2$  の地点で適応度ギャップが存在する．青い  $J$  は適応度 1，灰色の  $J$  は適応度 0 ( $\tilde{J}_t$  のみ 0.5) である．

この結果から予想される， $T_S$  低温の場合の適応 neutral space  $NS$  と非適応 neutral space  ${}^tNS$  の境界の描像を図 17(b) に示す．neutral space の端に位置する  $J$  は，1 point mutation により neutral space から落ちてしまうため，変異に対するロバストネス (mutational robustness) は低

\*ターゲットに  $n_a > N/2$  の反強磁性ボンダが存在する場合，基底はターゲットが反転した配位で与えられるためである．

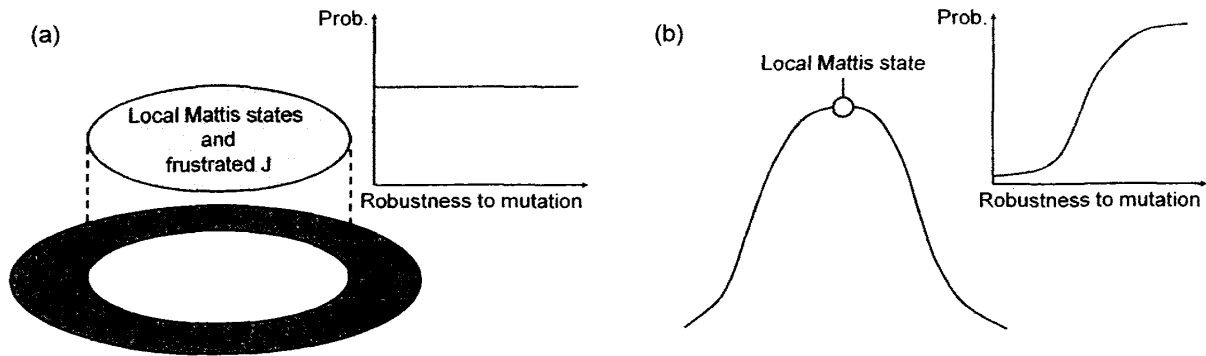


図 18: 強磁性体  $J^0$  適応度地形の  $T_S$  依存性と、適応度地形から考えられる、mutational robustness を横軸とした  $J$  の分布.

(a):  $T_S \leq T_S^{c1}$  の場合の適応度地形と mutational robustness の分布.

(b):  $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  が高温の場合の適応度地形と mutational robustness の分布.

い. 一方, neutral space の中央に位置する local Mattis state の mutational robustness は高い. しかし neutral space の中央に位置していても, 端に位置していても, 適応度は同じ 1 である. mutational robustness の高い  $J$  と低い  $J$  に適応度差が無いと, どちらも全て一様に採用されてしまう. mutational robustness の低い  $J$  が淘汰されないために,  $T_S$  低温で適応した  $J$  の mutational robustness が低く, 図 9 で示されたように, 変異によって適応できなくなることがわかる. このような考察から考えられる適応度地形と mutational robustness の分布を図 18.(a) に示した.

一方,  $T_S$  中間温度での適応度ピーク (local Mattis state) は, 谷まで滑らかに繋がり, 一つの山が形成されていることがわかる. このような山は  $W_g(N-t)$  個存在し, 初期条件から一番近いピークに登ると考えられる. 図 18.(b) に,  $T_S$  中間温度の場合の適応度地形と, そこから予想される mutational robustness の分布を図示した. 滑らかな山が形成されていることにより, mutational robustness も連続的に変化している. 頂点に近づくほど, mutational robustness が高く, 裾の方は mutational robustness は低い. つまり適応度の高い  $J$  は mutational robustness も高いため, 進化ダイナミクスで適応度の山に登ることは, mutational robustness を高めることに等しい. mutational robustness の低い  $J$  は適応度も低く, 淘汰される. よって  $T_S$  中間温度においては, 進化によって mutational robustness を獲得できることがわかる.

このように適応度地形を解析的に探ることにより,  $T_S$  中間温度で mutational robustness を獲得できる仕組みを説明することができた.

## 5 Conclusion

最後に, 本論文の流れと結果をまとめ, 今後の課題について考える.

スピンモデル上で, 遺伝子型を  $J$ , 表現型を  $S$  として, ハミルトニアンと温度  $T_S$  が与えるスピンドイナミクスを表現型発現ダイナミクスとした進化モデルを構成した. スピン定常状態においてターゲットパターンを実現させやすい  $J$  を優先的に選ぶ進化を行ったところ, 表現型発現ダイナミクスにかかる揺らぎを調節することにより, 異なる遺伝子型が得られることがわかった. 特に  $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  においては変異に対してロバストな  $J$  が選択された. このロバストな  $J$  はフラストレーションのパラメータ  $(\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3)$  を用いると  $\Phi_1, \Phi_2 = 1, \Phi_3 \neq 1$  と表すことが出来, これを local Mattis state と呼んだ.  $T_S < T_S^{c1}$  で得られる  $J$  にはフラストレーショ

ンが多く存在し、エネルギー地形はスピングラス的であった。

なぜ有限温度の領域で local Mattis state が観測されるのか、その理由を探るため 4 章において Mattis state と local Mattis state, さらに適応できない  $J$  の配位と適応度を求めた。それらの解析を通して、図 18 の描像を得、表現型揺らぎの大きさとロバストネスの関係を定性的に説明することに成功した。

今回は  $N = 15, t = 3$  における数値計算及び解析を行ったが、ここで得られた結果の一般性を議論することが必要である。ターゲット数  $t$  とは、 $N$  スピンのうち拘束条件の課されているスピン数であり、系の冗長性を表すパラメータでもある。 $t$  が小さければ、適応関数に関わらないスピンが増えるため、冗長なスピンが多く存在する。この冗長性の果たす役割を検証することが必要である。

現在までの観察では、 $t/N$  を固定して  $N$  と  $t$  を変化させると、同様に  $T_S$  中間温度で local Mattis state が得られることが示されている。また  $T_J$  が低い領域では、適応度、エネルギーどちらも全て同じスケール直線上で議論できる可能性が示唆された。4 章で求めた表式を用いて、これらの結果を定量的に記述することが必要である。また  $N = 15$  に固定したうえで  $t$  を動かしたところ、やはり同様に  $T_S$  中間温度で local Mattis state を得た。しかし、 $T_S$  低温においては  $t$  の影響は殆ど無いものの、 $T_S$  中間温度においては  $t$  依存性が強く、local Mattis state を獲得できる領域が小さくなることがわかった。このことから、local Mattis state のロバストネスは、冗長性のパラメータ  $t/N$  と関係していることがわかる。

また、図 18 で得た適応度地形の構造を、さらに詳しく解析することも必要である。 $T_S$  低温では適応度 1 の neutral space が形成されることがわかった。今回は、この neutral space が適応度の谷と接していること、それに伴い mutational robustness が低くなることを示した。しかし、neutral space の具体的構造はまだ得られていない。特に mutational robustness をより正確に議論するためには neutral space のバルクと表面の比を求めることが必要である。 $J$  の一つ一つの配位を調べ、neutral space の構造を把握するのは困難であるが、様々な  $N$  と  $t$  のもとで変異に対するロバストネスを観察し、統計的手法により neutral space の構造を知ることが可能であると考えている。表面がバルクと同じオーダーであれば、同様の振る舞いが異なる  $N$  においても見られると予想される。

また、ここで行った解析計算は、強磁性相互作用に摂動的に反強磁性相互作用を加えることで、適応度変化を見る方法であった。これはスピン系において用いられる低温展開を  $J$  に対して行っていることになる。 $T_S$  中間温度では、 $T_J$  変化によって適応度やエネルギーが急激に変わるので、臨界  $T_J$  まで  $J$  の低温展開を続けていけば、 $T_J$  に伴う変化を見ることができるであろう。しかし  $J$  配位の量は  $N^2$  で増加するため、このような解析は困難である。そこで Partial annealing method による平均場的な解析などが考えられる。Partial annealing とは、ニューラルネットのモデルとして導入された、 $J$  の時間発展も考慮したモデルである [21],[22]。  $J$  のエネルギー関数を  $S$  の自由エネルギーとした場合、 $S$  と  $J$  の温度比がレプリカ数  $n = T_S/T_J$  に対応する。このモデルにおいては、フラストレーションに関する転移の存在が示唆されている。本研究の場合は、 $J$  のエネルギー関数は  $S$  の適応関数であるが、partial annealing の方法を用いて議論することは可能であると考えている。

最後に  $T_S^{c1} \leq T_S \leq T_S^{c2}$  で得られた local Mattis state について触れておく。 $T_S < T_S^{c1}$  で得られたスピングラス相、また  $T_S > T_S^{c2}$  で得られた常磁性相は、統計力学の分野でよく知られている相である。一方、local Mattis state は、タンパク質において知られているファンネル地形と酷似している。[1],[2],[3]  $T_S$  による転移をさらに理論的に研究する必要がある。またファンネル地形は、スムーズな緩和を実現させるものであるが、このようなダイナミクスは遺伝子ネット

ワークなどの様々な研究においても知られている [27],[28]. ハミルトン系以外においても, 同様の結果が見出されるのか検証したい.

## Appendix

### A $N \rightarrow \infty$ での local Mattis state の分配関数と適応度の近似形

4.4 では,  $n_a$  本の反強磁性ボンドがサイトを共有しない  $\mathbf{J}^{n_a}$  の分配関数  $Z(\mathbf{J}^{n_a})$  と  $Z_f(\mathbf{J}^{n_a})$  を, 励起状態に関する和で表した. それぞれ

$$Z(\mathbf{J}^{n_a}|N, T_S) = e^{-2\beta n_a} \left[ Z(\mathbf{J}^0|N, T_S) + \sum_{i=1}^{n_a} 2^i C_i^{n_a} \left( 2e^{2\beta} \sinh(2\beta) \right)^i \sum_{n=i}^{N-i} e^{-\beta E_n(\mathbf{J}^0)} C_{n-i}^{N-2i} \right] \quad (\text{A.1})$$

$$Z_f(\mathbf{J}^{n_a}|N, t, T_S) = e^{-2\beta n_a} \left[ Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T) + 2 \sum_{i=1}^{n_a} 2^i C_i^{n_a} \left( 2e^{2\beta} \sinh(2\beta) \right)^i \sum_{n=i}^{N'-i} C_{n-i}^{N'-2i} e^{-\beta E_n(\mathbf{J}^0)} \right] \quad (\text{A.2})$$

である.  $N' = N - t$  とした.  $Z(\mathbf{J}^0|N, T_S)$ ,  $Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T)$  は

$$Z(\mathbf{J}^0|N, T_S) = e^{\beta C_2^N} \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\beta(N-n)n} \quad (\text{A.3})$$

$$Z_f(\mathbf{J}^0) = 2e^{\beta C_2^N} \sum_{n=0}^{N-t} C_n^{N-t} e^{-2\beta(N-n)n} \quad (\text{A.4})$$

である. しかしこれらの表式は  $N$  の増加とともに計算回数が増加し, 評価が難しくなる. そこで  $N \rightarrow \infty$  極限での近似形を求めたい.

まず強磁性の分配関数  $Z(\mathbf{J}^0)$  が Hubbard-Stratonovitch 変換を用いて

$$\begin{aligned} Z(\mathbf{J}^0|N, T_S) &= \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left( \frac{\beta}{N} \sum_{i < j} S_i S_j \right) = \text{Tr}_{\mathbf{S}} \exp \left( \frac{\beta}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{\beta}{2} \right) \\ &= e^{-\beta/2} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \int dm \exp \left[ N \left( -\frac{\beta}{2} m^2 + \ln(2 \cosh(\beta m)) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

と積分表示でき,  $N \rightarrow \infty$  極限で鞍点評価

$$\lim_{N \rightarrow \infty} Z(\mathbf{J}^0|N, T_S) = \exp N \left[ -\frac{\beta}{2} m^{*2} + \ln(2 \cosh(\beta m^*)) \right] \quad (\text{A.6})$$

が可能であることを利用する.  $m^*$  は強磁性体の平均場方程式

$$m^* = \tanh(\beta m^*) \quad (\text{A.7})$$

で与えられる. (A.5) と (A.3) は等しいので, (A.6) は (A.3) の近似形である. また (A.5) と (A.3) が等しいことから,

$$\begin{aligned} e^{\frac{\beta}{N} C_2^N} \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} &= e^{-\beta/2} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \int dm \exp \left[ N \left( -\frac{\beta}{2} m^2 + \ln(2 \cosh(\beta m)) \right) \right] \\ \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} &= \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \int dm \exp \left[ N \left( -\frac{\beta}{2} (1 + m^2) + \ln(2 \cosh(\beta m)) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$



という関係式も得られる． $N \rightarrow \infty$  極限で右辺の積分部分を鞍点評価すると

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} = \exp \left[ N \left\{ -\frac{\beta}{2}(1 + (m^*)^2) + \log(2 \cosh(\beta m^*)) \right\} \right] \quad (\text{A.9})$$

を得る．ここで次の関数を定義する．

$$f(i) = \sum_{n=i}^{N-i} e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_{n-i}^{N-2i} \quad (\text{A.10})$$

これは (A.1) の中に含まれる和である．(A.9) では  $i = 0$  の場合の  $f(i)$  を求めた． $\mathbf{J}^{n_a}$  の分配関数を求めるには， $f(i)$ ，( $i = 0, 1, \dots, n_a$ ) が分かればよい． $f(0)$  はすでに  $N \rightarrow \infty$  での近似形 (A.9) が求められているので， $f(i)$ ， $i \geq 1$  の近似形を求めたい．

まず  $i = 1$  の場合を考える．二項係数  $C_{n-1}^{N-2}$  を変形すると

$$\begin{aligned} f(1) &= \sum_{n=1}^{N-1} e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_{n-1}^{N-2} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{n=0}^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_n^N n(N-n) \\ &= -\frac{1}{2(N-1)} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n=0}^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_n^N \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

となる．左辺の和の範囲は  $n = 1 \sim N-1$  であるが右辺は係数  $n(N-n)$  により  $n = 0$ ， $n = N$  は自動的に 0 となるので，和の範囲に加えても問題はない．よって右辺の和の範囲は  $n = 0 \sim N$  としておく．さらに係数  $n(N-n)$  は  $\beta$  微分で得られることを利用した．(A.11) の両辺を  $i = 0$  の (A.10) で割り， $N \rightarrow \infty$  極限を取り (A.9) を用いると

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{f(1)}{f(0)} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_{n=1}^{N-1} e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_{n-1}^{N-2}}{\sum_{n=0}^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_n^N} \\ &= -\frac{1}{2(N-1)} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{n=0}^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_n^N \simeq \frac{1}{4}(1 - m^{*2}) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

を得る． $\mathbf{J}^1$  の分配関数を求める上で必要なのは  $i = 1$  の (A.10) であるので，ここまでの計算により， $\mathbf{J}^1$  の分配関数を求めることができる．

$$Z(\mathbf{J}^1) = \left[ e^{-2\frac{\beta}{N}} + 2C_1^1 \left( 2 \sinh \left( 2\frac{\beta}{N} \right) \right) \frac{1}{4}(1 - m^{*2}) \right] Z(\mathbf{J}^0) \quad (\text{A.13})$$

$i \geq 2$  の (A.10) も同様に求めることができる．例として  $i = 2$  の場合を考えてみる．

$$\begin{aligned} f(2) &= \sum_{n=2}^{N-2} e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_{n-2}^{N-4} = \frac{1}{N(N-1)(N-2)(N-3)} \\ &\quad \times \left[ \left( -\frac{N}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \right)^2 - (N-1) \left( -\frac{N}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \right] \sum_{n=0}^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} C_n^N \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

係数が  $O(N^4)$  であるのに対し，第二項は  $O(N^3)$  である．よって  $N \rightarrow \infty$  極限では第一項の中の  $O(N^4)$  の項が残る．係数  $N^2$  を除いた， $\beta$  による二回微分により  $O(N^2)$  の項が存在すれば良い．そこで  $\beta$  による二回微分を調べてみる．先ほどと同様に， $f(0)$  で割っておく．

$$\frac{\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n}}{\sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n}} = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} + \left( \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} \right)^2 \quad (\text{A.15})$$

第一項は  $O(N)$ 、第二項は  $O(N^2)$  である。よって第二項だけ残し、

$$\begin{aligned} f(2) &= \sum_{n=2}^{N-2} C_{n-2}^{N-4} e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} \simeq \frac{1}{4} \left[ -\frac{1}{2}(1-m^{*2}) \right]^2 \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} \\ &= \frac{1}{16} (1-m^{*2})^2 f(0) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

という関係式が得られる。一般に

$$\begin{aligned} f(i) &= \sum_{n=i}^{N-i} C_{n-i}^{N-2i} e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} \simeq \left( -\frac{1}{2} \right)^i \left[ -\frac{1}{2}(1-m^{*2}) \right]^i \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} \\ &= \left[ \frac{1}{4}(1-m^{*2}) \right]^i f(0) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

となる。これを (A.1) に代入すると

$$Z(\mathbf{J}^{n_a}) = \left( e^{-2\frac{\beta}{N}} + \sinh \left( 2\frac{\beta}{N} \right) (1-m^{*2}) \right)^{n_a} Z(\mathbf{J}^0) \quad (\text{A.18})$$

が得られる。したがって強磁性体の自由エネルギーと  $\mathbf{J}^{n_a}$  の自由エネルギーは

$$F(\mathbf{J}^{n_a}) = -k_B T n_a \ln \left( e^{-2\frac{\beta}{N}} + \sinh \left( 2\frac{\beta}{N} \right) (1-m^{*2}) \right) + F(\mathbf{J}^0) \quad (\text{A.19})$$

という関係にあることがわかる。  $k_B$  はボルツマン定数である。

次に  $Z_f(\mathbf{J}^{n_a})$  の近似形を求める。やはり出発点は  $Z_f(\mathbf{J}^0)$  である。(A.4) を  $N' = N - t$  を用いて書きなおすと

$$Z_f(\mathbf{J}^0) = 2e^{\frac{\beta}{N}C_2^N} \sum_{n=0}^{N'} C_n^{N'} e^{-2\frac{\beta}{N}(N'-n)n} e^{-2\frac{\beta}{N}tn} \quad (\text{A.20})$$

となる。(A.20) の積分表現を求め、鞍点評価したい。分配関数の場合とは異なるのは、因子  $e^{-2tn/N}$  の部分である。 $n$  とは  $-1$  スピンの数であった。そこで  $-1$  を取るスピンの磁場  $2t/N$  のかかるハミルトニアン

$$H'(\mathbf{S}|\mathbf{J}^0, N, t) = -\frac{1}{N} \sum_{i < j} S_i S_j - \frac{2t}{N} \sum_i \frac{S_i - 1}{2} \quad (\text{A.21})$$

を定義し、その分配関数  $Z'$  を求めて、そこから (A.20) の近似形を求めることを試みる。まずエネルギー準位に関する和の形で書くと

$$Z'(\mathbf{J}^0|N, t, T_S) = e^{\frac{\beta}{N}C_2^N} \sum_{n=0}^N C_n^N e^{-2\frac{\beta}{N}(N-n)n} e^{-2\frac{\beta}{N}tn} \quad (\text{A.22})$$

となる。積分表示は

$$Z'(\mathbf{J}^0|N, t, T_S) = e^{-\beta t} e^{-\beta/2} \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \int dm \exp \left[ N \left( -\frac{\beta}{2} m^2 + \ln \left( 2 \cosh \left( \beta m + \frac{\beta t}{N} \right) \right) \right) \right] \quad (\text{A.23})$$

となる。ここで求めたい (A.20) と、磁場ありハミルトニアン  $H'$  の分配関数 (A.22) を比較すると

$$e^{-\frac{\beta}{N}C_2^N} Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T_S) = 2e^{-\frac{\beta}{N}C_2^{N'}} Z'(\mathbf{J}^0|N', t, T_S') \quad (\text{A.24})$$

という関係にあることがわかる。  $T' = N/N' \times T$  とした。 (A.22) と (A.23) が等しいことを使うと

$$Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T_S) = 2e^{\frac{\beta}{N}(C_2^N - C_2^{N'})} e^{-\beta' t} e^{-\beta'/2} \times \sqrt{\frac{\beta' N'}{2\pi}} \int dm \exp \left[ N' \left( -\frac{\beta'}{2} m^2 + \ln \left( 2 \cosh \left( \beta' m + \frac{\beta' t}{N'} \right) \right) \right) \right] \quad (\text{A.25})$$

を得る。  $\beta' = 1/T'$  とした。  $N \rightarrow \infty$  で鞍点評価すると

$$Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T_S) \simeq \exp N' \left[ -\frac{\beta'}{2} \left( 2\frac{t}{N'} + m^2 - \frac{N^2 - N'^2}{NN'} \right) + \ln \left( 2 \cosh \left( \beta' m + \frac{\beta' t}{N'} \right) \right) \right] \quad (\text{A.26})$$

となる。  $m$  は、鞍点方程式

$$m = \tanh \left( \beta' m + \frac{\beta' t}{N'} \right) \quad (\text{A.27})$$

から決まる。分配関数同様に、強磁性体の  $Z_f(\mathbf{J}^0)$  が求まった。

さらにここから  $Z_f(\mathbf{J}^{n_a})$  を求める。手続きは分配関数と同じで、

$$g(i) = \sum_{n=i}^{N-i} e^{-2\frac{\beta}{N}(N'-n)n} C_{n-i}^{N'-2i} e^{-2\frac{\beta}{N}tn} \quad (\text{A.28})$$

の一般の  $i$  での近似形を求めればよい。  $i = 1$  の場合のみ示すと、

$$g(1) = \sum_{n=1}^{N'-1} e^{-2\frac{\beta}{N}(N'-n)n} C_{n-1}^{N'-2} e^{-2\frac{\beta}{N}tn} = -\frac{N}{2N'^2} \left( \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{t}{\beta} \frac{\partial}{\partial t} \right) \sum_{n=0}^{N'} e^{-2\frac{\beta}{N}(N'-n)n} C_n^{N'} e^{-2\frac{\beta}{N}tn} \quad (\text{A.29})$$

となる。分配関数の計算同様に、  $N \rightarrow \infty$  で残る部分をまとめると、

$$Z_f(\mathbf{J}^{n_a}|N, t, T) = \left( e^{-2\frac{\beta}{N}} + \sinh \left( 2\frac{\beta}{N} \right) \left( \frac{N'}{N} - m^2 - \frac{4t}{N'}(1-m) \right) \right)^{n_a} Z_f(\mathbf{J}^0|N, t, T) \quad (\text{A.30})$$

を得る。

## 参考文献

- [1] N. Go, “Theoretical studies of protein folding”, Annual Review of Biophysics and Bioengineering **12** (1983) 183-210.
- [2] J. D. Bryngelson and P. G. Wolynes, “Spin Glasses and the statistical mechanics of protein folding”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **84** (1987) 7524-7528.
- [3] J. N. Onuchic and P. G. Wolynes, “Theory of protein folding”, Current Opinion in Structural Biology **14** (2004) 70-75.
- [4] S. Saito, M. Sasai, and T. Yomo, “Evolution of folding ability of proteins through functional selection”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **94** (1997) 11324-11328.
- [5] C. R. Landry, B. Lemos, S. A. Rifkin, W. J. Dickinson and D. L. Hartl, “Genetic Properties Influencing the Evolvability of Gene Expression”, Science **317** (2007) 118-121.
- [6] H. Maamar, A. Raj and D. Dubnau, “Noise in Gene Expression Determines Cell Fate in *Bacillus subtilis*”, Science **317** (2007) 526-529.
- [7] L. W. Ance and W. Fontana, “Plasticity, Evolvability, and Modularity in RNA”, J. Exp. Zool. (Mol. Dev. Evol.) **288** (2000) 242-283.
- [8] K. Kaneko, “Evolution of Robustness to Noise and Mutation in Gene Expression Dynamics”, PLoS ONE **2** (5) (2007) 1-8.

- [9] K. Kaneko, “*Shaping Robust System through Evolution*”, Chaos (2008) in press.
- [10] 西森秀稔, 『スピングラス理論と情報統計力学』 (岩波書店, 1999 年).
- [11] A. Wagner, *Robustness and Evolvability in Living Systems*, (Princeton University Press, 2005).
- [12] S. Ciliberti, O. C. Martin and A. Wagner, “*Robustness Can Evolve Gradually in Complex Regulatory Gene Networks with Varying Topology*”, PLoS Comput. Biol. **3** (2) (2007) 165-173.
- [13] A. Wagner, “*Does evolutionary plasticity evolve?*”, Evolution **50** (3) (1996) 1008-1023.
- [14] S. A. Kauffman, *AT HOME IN THE UNIVERSE: The Search for Laws of Self-Organization and Complexity*, (Oxford University Press, Inc, 1995).
- [15] D. L. Stein, *Spin Glasses and Biology -Directions in Condensed Matter Physics Vol.6*, (World Scientific Publishing Co. Ltd., 1992).
- [16] R. J. Glauber, “*Time-Dependent statistics of the Ising Model*”, Journal of Mathematical Physics, **4** (2) (1963) 294-307.
- [17] M. Eigen and R. Winkler, *DAS SPIEL Naturgesetze steuern den Zufall*, (R. Piper & Co. Verlag, München, 1975).
- [18] K. Hukushima and K. Nemoto, “*Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations*”, J. Phys. Soc. Jpn **65** (1996) 1604-1608.
- [19] J. J. Hopfield, “*Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities*”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **79** (1982) 2554-2558.
- [20] D. J. Amit, H. Gutfreund and H. Sompolinsky, “*Storing Infinite Numbers of Patterns in a Spin-Glass Model of Neural Networks*”, Phys. Rev. Lett. **55** (14) (1985) 1530-1533.
- [21] V. Dotsenko, F. Franz and M. Mézard, “*Partial annealing and overfrustration in disordered systems*”, J. Phys. A: Math. Gen. **27** (1994) 2351-2365.
- [22] R. W. Penney, A. C. C. Coolen and D. Sherrington, “*Coupled dynamics of fast spins and slow interactions in neural networks and spin systems*”, J. Phys. A: Math. Gen. **26** (1993) 3681-3695.
- [23] M. Mézard, G. Parisi, M. A. Virasoro, eds., *Spin Glass Theory and Beyond*, (World Sci. Pub., 1987).
- [24] C. H. Waddington, *The Strategy of the Genes*, (George Allen & Unwin LTD., Bristol, 1957).
- [25] E. V. Nimwegen, J. P. Crutchfield and M. Huynen, “*Neutral evolution of mutational robustness*”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **96** (1999) 9716-9720.
- [26] 金子邦彦, 『生命とは何か 複雑系生命論序説』 (東京大学出版会, 2003 年).
- [27] K. Kaneko, K. Sato, T. Michiue, K. Okabayashi, K. Ohnuma, H. Danno, and M. Asashima, “*Developmental Potential Describing Morphogenesis in vivo and in vitro*”, J. Exp. Zool. B. (2008) in press
- [28] Alon U, Surette M G, Barkai N, Leibler S, *Robustness in bacterial chemotaxis*, Nature **397** (1999) 168-171.

## 謝辞

本修士論文は、金子邦彦教授、福島孝治准教授の御指導のもと完成いたしました。ここに感謝いたします。また、金子研、福島研の皆様をはじめ、駒場物性理論グループの皆様には大変お世話になりました。特に佐々真一准教授、中島千尋氏、観山正道氏、井上雅世氏、中田豊氏、平間毅氏、沢辺剛氏、中島哲也氏に感謝いたします。